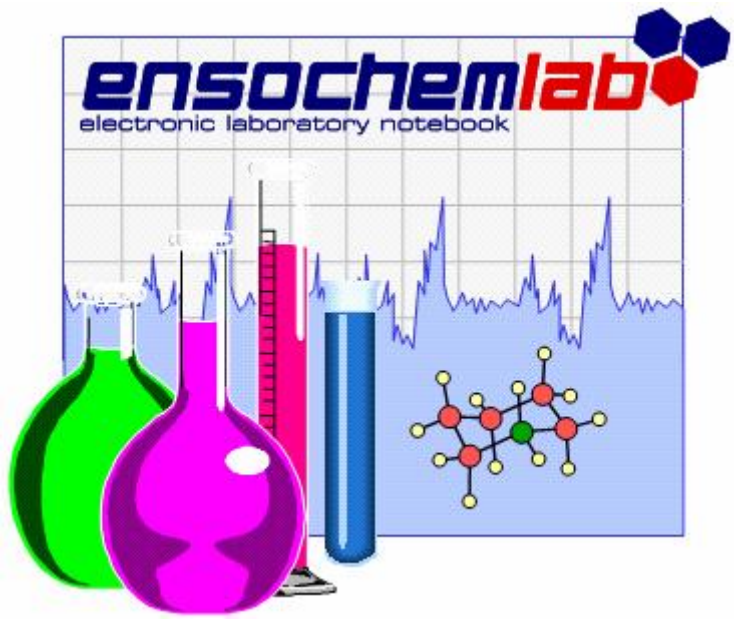
ensochemLab

Version 7.0

Benutzerhandbuch



enso Software GmbH

Schulhohlstraße 10a
64711 Erbach
Tel. +49 (6062) 910888
Fax +49 (6062) 910886
E-mail Kontakt@enso-software.com

Inhalt

1. Übersicht 1
2. Anmeldung 2
3. Erstellen Sie Ihr erstes Experiment 3
   - 3.1. Kopfdaten 4
   - 3.2. Reaktion 6
   - 3.3. Edukte 9
   - 3.4. Produkte 15
   - 3.5. Beschreibung 21
     - 3.5.1. Beschreibung (Rich Text) 21
     - 3.5.2. Tabellarische Beschreibung 26
     - 3.5.3. Reaktionsparameter 28
   - 3.6. Analytik 29
   - 3.7. Literatur 31
   - 3.8. Berechnungsseite 33
   - 3.9. Experimente speichern 35
   - 3.10. Experimente kopieren 38
4. Automatische Berechnungen 40
   - 4.1. Allgemeine Einstellungen 40
   - 4.2. Einstellungen für automatische Berechnungen 43
   - 4.3. Beispiele von Einstellungen der automatischen Berechnung 46
     - 4.3.1 Allgemein 46
     - 4.3.2 Änderung der Stoffmenge des Referenzedukts 46
     - 4.3.3 Änderung der Menge des Produkts 46
     - 4.3.4 Änderung der Ausbeute 47
     - 4.3.5 Änderung des Gehalts 47
   - 4.4. Spezielle Einheiten des Gehalts 48
     - 4.4.1 Molprozent 48
     - 4.4.2 Volumen / Volumen 48
     - 4.4.3 Flächenprozent 48
     - 4.4.4 Fraktionen 48
   - 4.5. Berechnungsvorlagen 49
   - 4.6. Berechnungsfunktionen 52
   - 4.7. Edukte von der Berechnung ausschließen 53
5. Das Hauptfenster 54
   - 5.1. Der Navigator 55
   - 5.2. Die Experimentanzeige 56
   - 5.3. Binärdaten anzeigen und verwalten 61
   - 5.4. Die Ordnerübersicht 64
   - 5.5. Die Versionsverwaltung 65
   - 5.6. Produktdaten mit Zielmolekül vergleichen 69
6. Die Direkteingabe 71
7. Arbeiten mit Versuchsverläufen 73
8. Anzeigelayouts verwalten 80
9. Suchfunktionen 85
   - 9.1. Chemie 87
   - 9.2. Experimente 88
   - 9.3. Versuchsreihen 89
   - 9.4. Zielstrukturen 89
   - 9.5. Eigene Experimente 90
   - 9.6. Eigene Experimente mit Status in Arbeit 90
   - 9.7. Suchanfrage 91
   - 9.8. Behandlung der Suchergebnisse 94
   - 9.9. Volltextsuche in Anhängen 95

10. Berichte 96
10.1. Abfrage definieren 97
10.2. Statischer Filter 100
10.3. Datenfelder für Anzeige 101
10.4. Berichtsvorschau 103
10.5. Bericht speichern 104
10.6. Berichte anzeigen und verwalten 105
10.7. List & Label Berichte 111
11. Ausdrucke 119
12. Listenoperationen 124
13. Arbeiten mit Experimentlisten 127
13.1. Experimentliste abschließen 128
13.2. Sichtbarkeit einer Experimentliste ändern 130
13.3. Liste übernehmen 133
13.4. Experimentliste weitergeben 136
14. Arbeiten mit Fraktionen 137
14.1. Beispiel A 137
14.2. Beispiel B 149
14.3. Beispiel C 151
15. Mehrstufige Reaktionen 154
15.1. Generelle Einführung 154
15.2. Datenerfassung 155
15.3. Ansicht 162
15.4. Löschen 163
16. Datenaustausch mit CSV 164
16.1. Export von tabellarischen Daten nach CSV 164
16.2. Import von tabellarischen Daten aus CSV 166
16.3. Export von Experimentdaten nach CSV 173
16.4. Import von Experimentdaten aus CSV 179
17. Anpassen Ihrer Einstellungen 184
17.1. Allgemeines 186
17.1.1. Benutzeroberfläche 186
17.1.2. Zwischenspeicher 187
17.1.3. Binärdaten 188
17.1.4. Dezimalstellen 188
17.1.5. Chemie Editor 189
17.1.6. Suchen 189
17.2 Farben 190
17.2.1. Experimente 190
17.2.2. Benutzeroberfläche 190
17.3. Zeichensatz 190
17.4. Chemieanzeige 191
17.4.1. Allgemeines 191
17.4.2. Hervorhebungen 192
17.5. Berechnungen 193
17.6. Ausdrucke 194
17.7. MS Office Integration 195
17.8. Eingabeassistent 196
18. Benutzerdefinierte Textbausteine 197
19. Die Reagenzien-Datenbank 199
19.1. Reagenzien suchen 199
19.2. Reagenzien anzeigen 200
20. Die Laborwerkzeuge 203
20.1. Einheitenrechner 204
20.2. Mischungskreuz 205

20.3. Zusammensetzung berechnen 206
21. Anhang A: Glossar 208
22. Anhang B: Felder und Suchmodi 214
23. Anhang C: Erweiterungen 218

1. Übersicht

Dieses Benutzerhandbuch bietet sowohl Neueinsteigern als auch erfahrenen Benutzern nützliche Informationen zum täglichen Umgang mit dem elektronischen Laborjournal „ensochemLab“.

ensochemLab wurde für den Einsatz im professionellen Bereich konzipiert und ermöglicht Ihnen ein komfortables Arbeiten.

Hier erfahren Sie, wie Sie das Programm möglichst effizient nutzen können und welche Funktionen Ihnen zur Verfügung stehen, um Ihre tägliche Arbeit zu erleichtern.

Diese Anleitung ist als Schritt-für-Schritt Einführung angelegt, kann aber auch als Referenzhandbuch verwendet werden.

Wir empfehlen, dass Sie sämtliche hier beschriebenen Schritte und die Beispiele einmal durchführen, bevor Sie die tägliche Arbeit mit ensochemLab beginnen.

Jedes Kapitel hat an seinem Ende eine Zusammenfassung, die noch einmal die wichtigsten Aspekte des jeweiligen Themas aufgreift und verdeutlicht. An einigen Stellen der Anleitung finden Sie Anmerkungskästchen, die einzelne Aspekte noch einmal aufgreifen und auf Details eingehen, die für die Anleitung zwar nicht zwingend erforderlich, aber dennoch nützlich sind und Hilfestellung bei Problemen bieten können.

Sind Sie nur an den Neuerungen dieser Version des Programms interessiert, finden sie eine kurze Zusammenstellung der wichtigsten Erweiterungen und Änderungen im Dokument „Release Notes“ oder auf unserer Webseite.

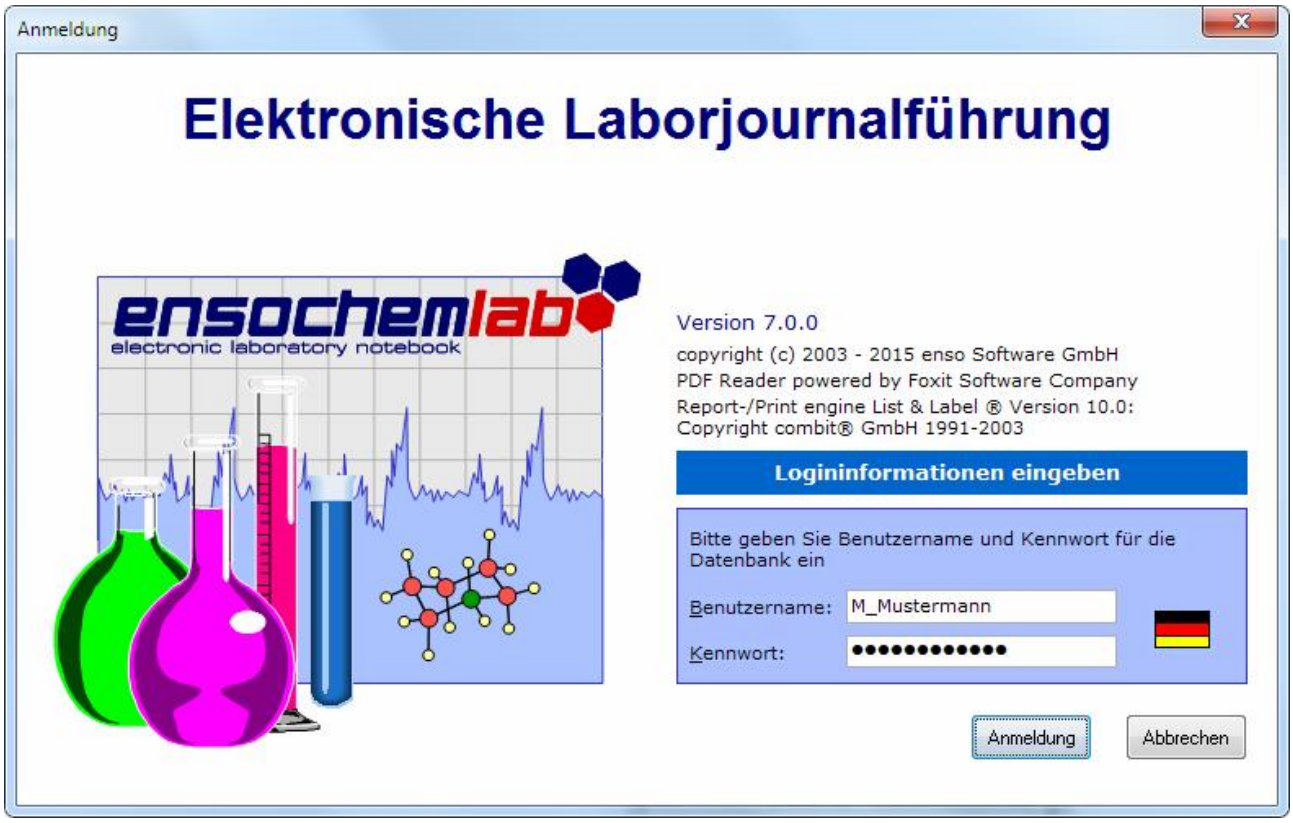
Sollten sie auf einen Ihnen nicht geläufigen Begriff stoßen, so finden sie eine Erklärung im Glossar (Anhang A).

Vielen Dank für den Einsatz von Produkten der enso Software GmbH.

2. Anmeldung

Bevor Sie ensochemLab nutzen können, müssen Sie sich anmelden. Dies identifiziert Sie gegenüber dem Datenbanksystem und legt Ihre Berechtigungen innerhalb des Programms fest.

ensochemLab prüft direkt nach dem Programmstart, ob für die verwendete Datenbank die Angabe von Benutzername und Kennwort zur Anmeldung nötig ist. Sollte dies der Fall sein, erhalten Sie das folgende Anmeldefenster:



Im Feld „Benutzername“ steht als Voreinstellung Ihr Windows Anmeldename. Überprüfen Sie, ob dies Ihrem Datenbank-Benutzernamen entspricht und ändern Sie ihn gegebenenfalls. Geben Sie danach Ihr Kennwort ein und klicken dann auf „Anmeldung

Anmerkung:	Sollten Sie nicht sicher sein, welche Daten Sie eingeben müssen, wenden Sie sich bitte an Ihren Datenbankadministrator. Die Anmeldeinformationen für die Datenbank müssen nicht zwangsläufig denen von Windows entsprechen.

Ist keine Angabe von Anmeldedaten nötig, werden Sie automatisch mit Ihrem Windows-Benutzernamen an der Datenbank angemeldet. Hierfür müssen Sie nichts eingeben oder bestätigen.

Zusammenfassung:	Vor der Verwendung von ensochemLab müssen Sie sich an der Datenbank anmelden. Dies erfolgt entweder automatisch oder Sie werden zur Eingabe von Benutzername und Kennwort aufgefordert.

3. Erstellen Sie Ihr erstes Experiment

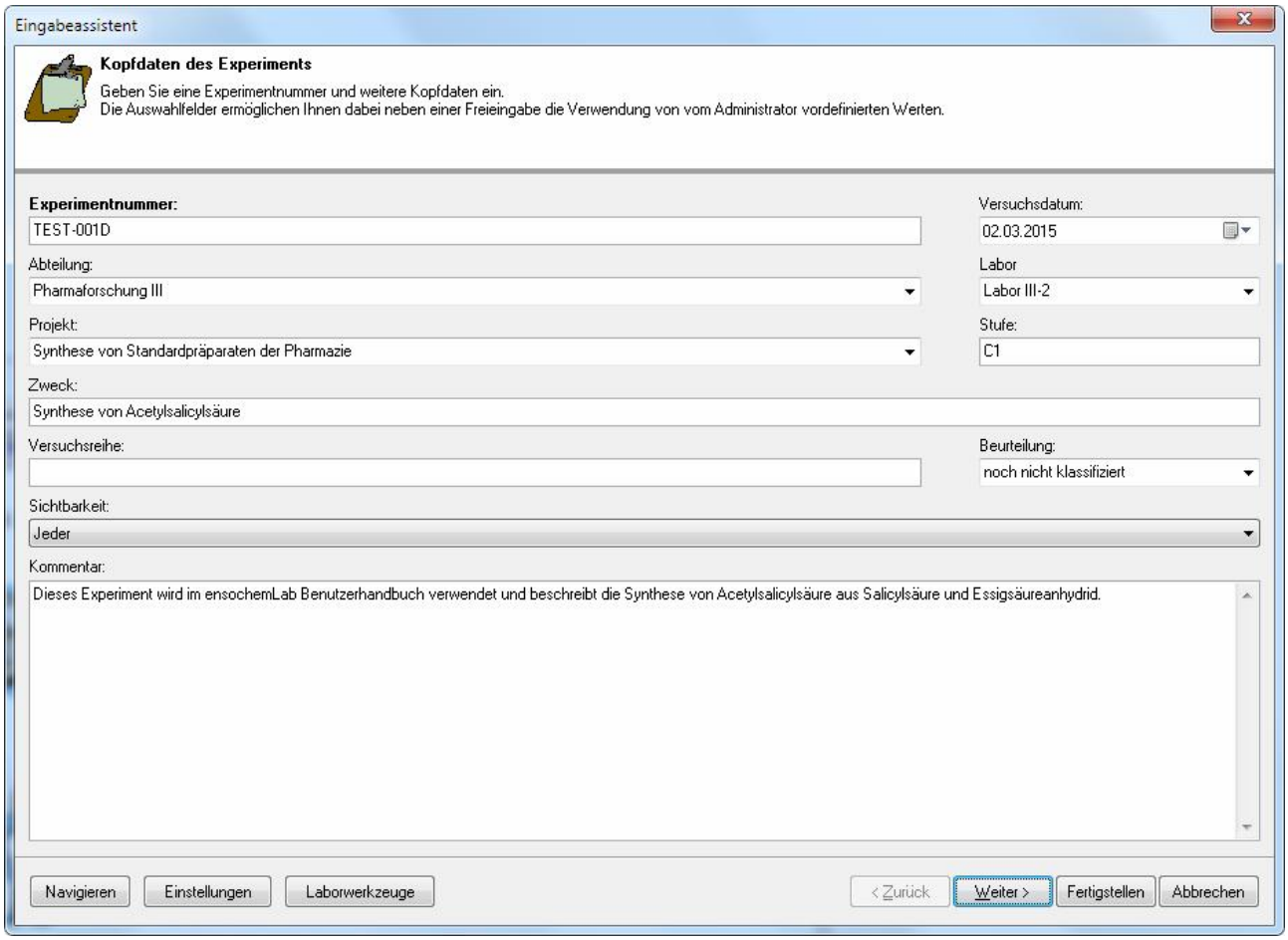
Sie sind nun mit der Datenbank verbunden und können Experimente anzeigen und bearbeiten. Da eventuell noch keine Experimente in der Datenbank gespeichert sind, beginnen wir mit dem Erstellen eines neuen Experimentes und kehren an einer späteren Stelle zu den Anzeigefunktionen im Hauptfenster zurück.

Klicken Sie im Menü „Experiment | Neues Experiment“.

Sie gelangen dann zum Eingabeassistenten, der die Eingabe eines Experiments erleichtert. Dieser Assistent gliedert das Experiment nach thematischen Gesichtspunkten in verschiedene Seiten. Im oberen Teil jeder Seite finden Sie eine kurze Beschreibung sowie einen erläuternden Hilfetext zu den jeweiligen Angaben.

3.1. Kopfdaten

Die Seite „Kopfdaten“ auf der Sie sich im Moment befinden, ist für allgemeine Angaben zum Experiment vorgesehen.



Die Experimentnummer muss immer angegeben werden. Ohne sie ist keine Speicherung möglich. Eine Experimentnummer muss eindeutig sein. D.h. wenn Sie eine Experimentnummer wählen, die schon einmal vergeben wurde, bekommen Sie beim Speichern eine Fehlermeldung und können nicht fortfahren, bevor Sie die Experimentnummer geändert haben.

Abhängig von Ihren Benutzereinstellungen kann es sein, dass die Experimentnummer bereits mit einem Präfix vorbelegt ist, an den sie nur noch eine eindeutige Endung anhängen müssen. Auf das Verändern dieser Einstellung wird das Kapitel „Anpassen Ihrer Einstellungen“ eingehen, zu dem wir später noch kommen werden.

Ihr Administrator kann auch eine vollständig automatische Erzeugung von Experimentnummern aktiviert haben. In diesem Fall ist das entsprechende Feld im Assistenten bereits vorbelegt. Bei einer grauen Hinterlegung, handelt es sich um eine fest vergebene Nummer, die Sie nicht mehr ändern können. Andernfalls ist es nur ein Vorschlag.

Das Feld „Sichtbarkeit“ ist nur verfügbar, wenn Ihr Administrator die integrierte ensochemLab Benutzerverwaltung aktiviert hat. Mit ihm können Sie festlegen, welche Benutzer Zugriff auf Ihr Experiment erhalten sollen. Die Möglichkeiten sind:

Sichtbarkeit	Bedeutung
Jeder	Jeder ensochemLab Benutzer kann das Experiment ohne Einschränkungen anzeigen
Standort	Alle Benutzer an Ihrem Standort können das Experiment anzeigen
Abteilung	Alle Benutzer in Ihrer Abteilung können das Experiment anzeigen
Labor	Alle Benutzer in Ihrem Labor können das Experiment anzeigen
Kostenstelle	Alle Benutzer mit der gleichen Kostenstelle wie Sie können das Experiment anzeigen
Privat	Nur Sie können das Experiment anzeigen

Diese Einschränkungen gelten auch für ensochemLab Administratoren. Bitte beachten Sie, dass „Abteilung“ auch „Labor“ einschließt, da es sich auf einer höheren organisatorischen Ebene befindet.

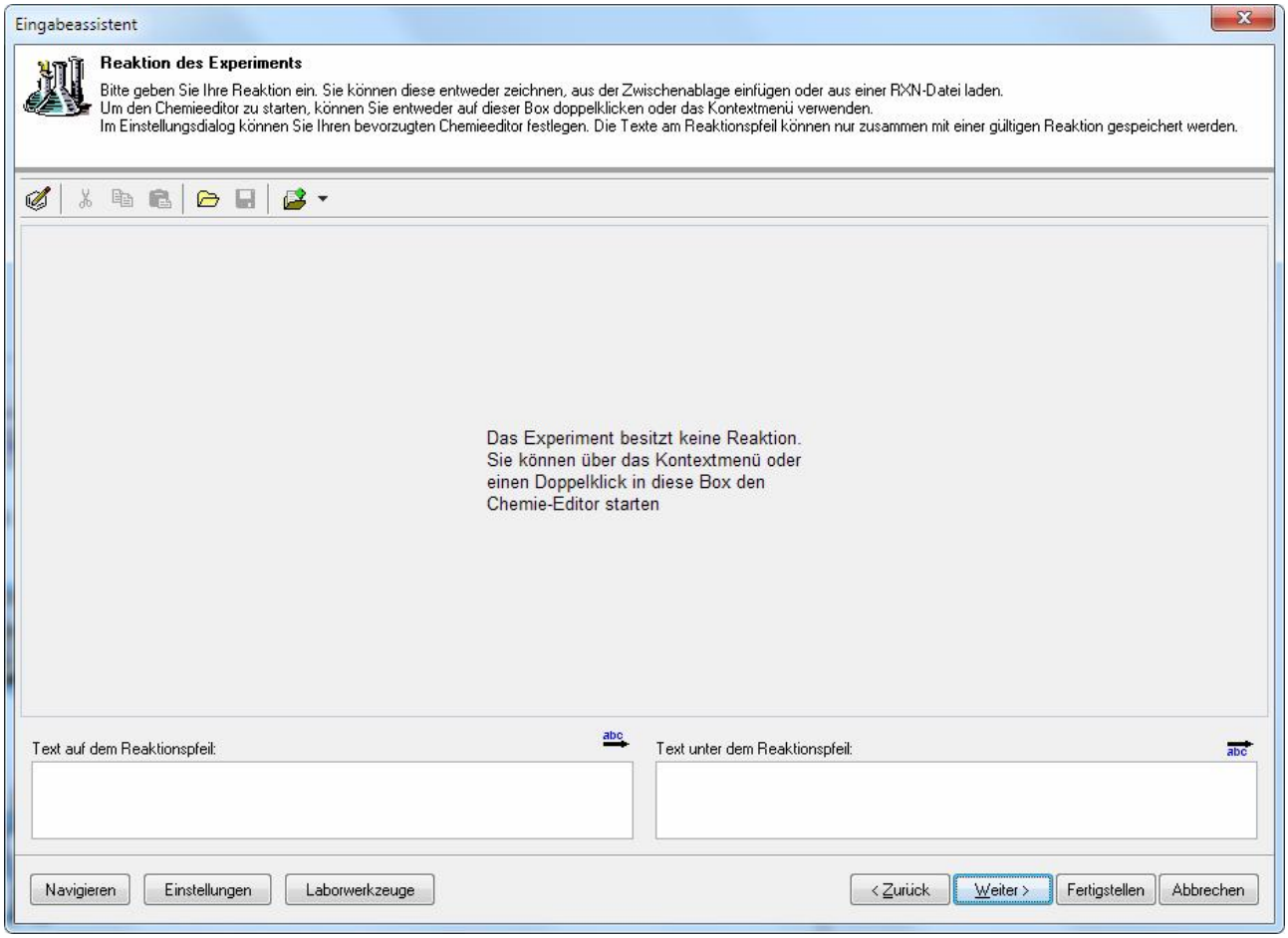
Als Beispiel geben Sie bitte die oben angezeigten Daten ein. Wenn Sie möchten, können Sie selbstverständlich auch andere Werte angeben. Beim ersten Mal empfehlen wir jedoch die oben Gezeigten zu verwenden, da wir sie später für die Beispiele noch verwenden werden.

Klicken Sie danach auf „Weiter“, um die nächste Seite im Assistenten anzuzeigen.

Anmerkung:	Wenn Sie eine spezielle Seite anzeigen möchten, so müssen Sie nicht so lange auf „Weiter“ klicken, bis Sie die Seite erreichen. Sie können auch auf “Navigieren” (an der linken unteren Seite des Dialoges) klicken und dann die gewünschte Seite auswählen.

3.2. Reaktion

Die nächste Seite des Assistenten besteht hauptsächlich aus einem großen, grauen Feld:

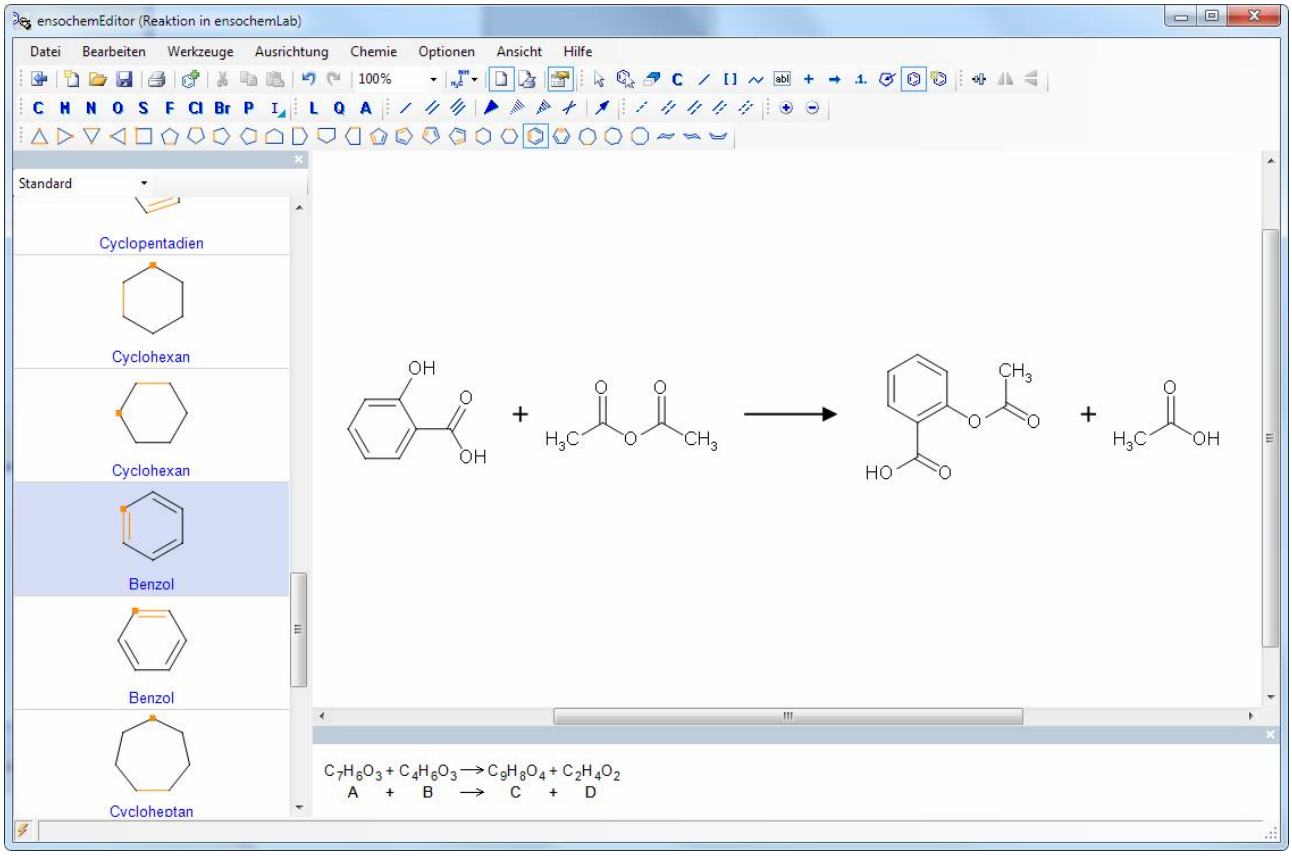

Eingabeassistent
Reaktion des Experiments
Bitte geben Sie Ihre Reaktion ein. Sie können diese entweder zeichnen, aus der Zwischenablage einfügen oder aus einer RXN-Datei laden.
Um den Chemieeditor zu starten, können Sie entweder auf dieser Box doppelklicken oder das Kontextmenü verwenden.
Im Einstellungsdialog können Sie Ihren bevorzugten Chemieeditor festlegen. Die Texte am Reaktionspfeil können nur zusammen mit einer gültigen Reaktion gespeichert werden.
Das Experiment besitzt keine Reaktion.
Sie können über das Kontextmenü oder
einen Doppelklick in diese Box den
Chemie-Editor starten
Text auf dem Reaktionspfeil:
Text unter dem Reaktionspfeil:
Navigieren
Einstellungen
Laborwerkzeuge
< Zurück
Weiter >
Fertigstellen
Abbrechen

Später werden Sie an dieser Stelle Ihre Reaktion sehen, die Sie nun natürlich erst eingeben müssen. Dies geschieht in der Standardeinstellung mit dem integrierten ensochemEditor. Natürlich können Sie in Ihren persönlichen Einstellungen auch einen anderen Chemieeditor auswählen.

Sie können ihn mit einem Doppelklick auf die graue Fläche oder über das Kontextmenü (rechte Maustaste) starten.

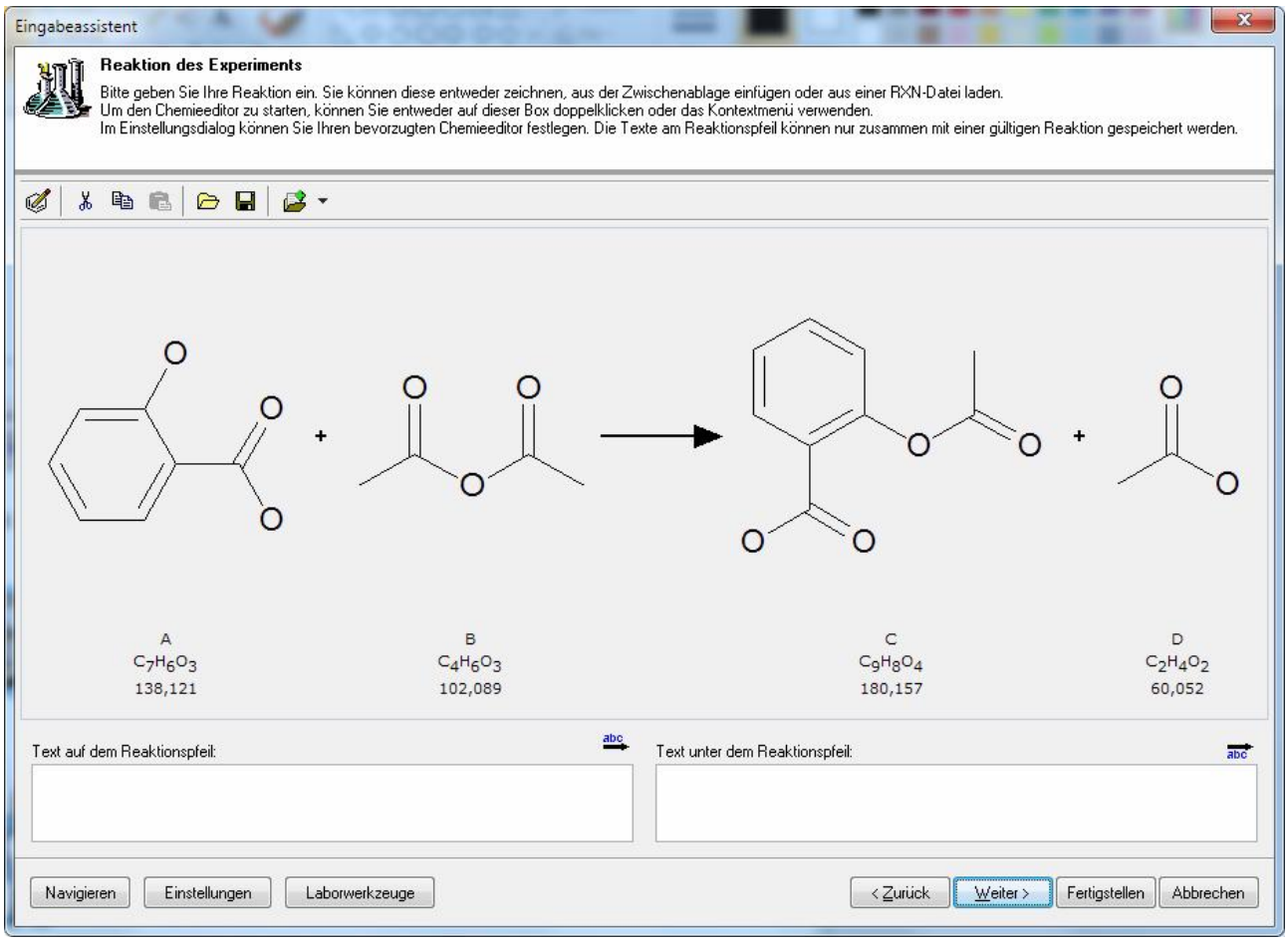
ensochemLab akzeptiert jede Reaktion, die aus mindestens einem Edukt oder einem Produkt sowie einem Reaktionspfeil besteht. Damit können Sie Ihre Produkte auch später nachtragen, falls diese zum Zeitpunkt der Eingabe noch nicht feststehen (z.B. erst durch Analytik ermittelt werden müssen).

Da die Reaktion unseres Beispielexperimentes jedoch wohlbekannt ist, können wir sie bereits an dieser Stelle vollständig eingeben.



Wenn Sie den integrierten ensochemEditor verwenden, kommen Sie mit dem Pfeil-Knopf links oben zurück in den Eingabeassistenten. Hinweise zur Bedienung erhalten Sie über die ausführliche Hilfe-Funktion im Editor.

Die gezeichnete Reaktion wird im Eingabeassistenten angezeigt:



Sollten Sie bereits über eine Reaktionsdatei im RXN-Format verfügen, so können Sie diese auch ohne den Editor zu starten direkt im Assistenten importieren, indem Sie in der Strukturbox mit der rechten Maustaste das Kontextmenü öffnen und auf „RXN-Datei importieren“ klicken.

Reaktionen können auch über die Zwischenablage mit anderen Programmen ausgetauscht werden. Auch das Ziehen mit der Maus (Drag & Drop) aus z.B. dem Windows Explorer ist möglich. Bitte beachten Sie, dass die Daten hierfür in einem der unterstützten Chemieformate vorliegen müssen.

Falls Sie die Wasserstoffatome sehen möchten, klicken Sie bitte mit der rechten Maustaste auf die Reaktion. Wählen Sie dann „Wasserstoffe anzeigen“ und dann die gewünschte Art der Anzeige.

Die hier gewählte Einstellung wird für das gesamte Programm verwendet und in Ihren benutzerdefinierten Einstellungen gespeichert. Sie können Ihre Auswahl jedoch bei allen weiteren Molekülen und Reaktionen wieder ändern. Dies werden wir uns im Kapitel „Einstellungen“ noch genauer ansehen.

Zusätzlich zur chemischen Reaktion können Sie optional noch Texte angeben, die unter bzw. über dem Reaktionspfeil angezeigt werden sollen. Füllen Sie hierzu bitte einfach die entsprechenden Felder im Dialog aus. Um die Anzeige mit den neuen Daten zu aktualisieren, klicken Sie bitte auf einen der „Aktualisieren“ Knöpfe (rechts oberhalb des Eingabefelds).

3.3. Edukte

Wir können nun zur nächsten Seite weitergehen.

Dort können Sie zusätzliche Informationen zu den Edukten, die Sie auf der vorherigen Seite definiert haben, angeben. Klicken Sie auf ein Edukt (auf der linken Seite auswählen) und seine Detaildaten werden auf der rechten Seite angezeigt. Die bereits angezeigten Daten wie Summenformel und Molare Masse wurden aus der Reaktion extrahiert.

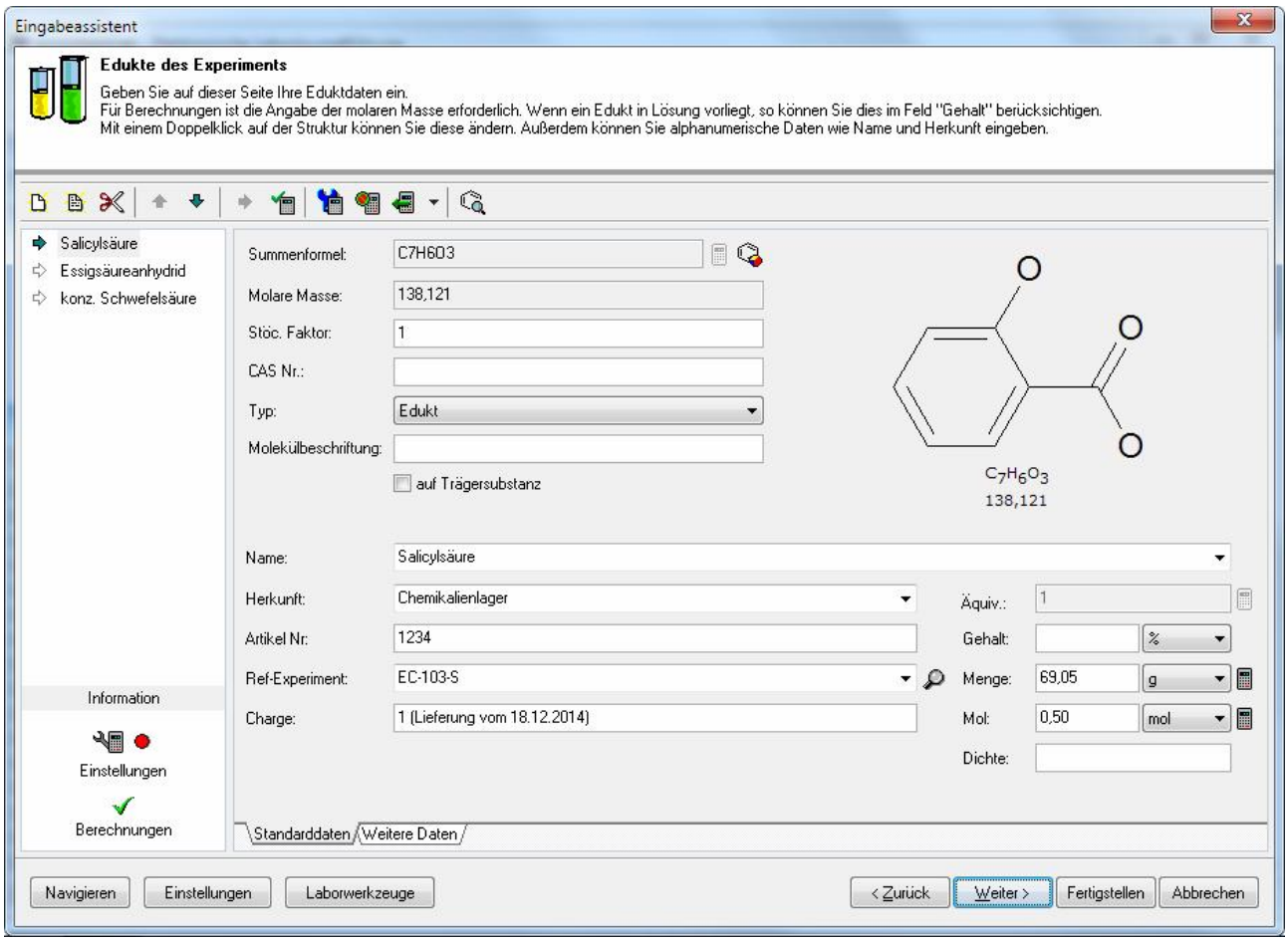
Als Beispiel geben wir die Bezeichnungen und Mengen an. Das Herkunfts-Feld ist ein Auswahlfeld. Sie können entweder eigene Eingaben machen oder einen vom Administrator vordefinierten Eintrag auswählen. Ihre neu eingegebene Herkunft steht Ihnen als Auswahl bei allen Edukten dieses Experiments zur Verfügung, wird aber nicht für weitere Experimente angezeigt. Um eine Herkunft für alle Experimente in die Liste aufzunehmen, wenden Sie sich bitte an Ihren Administrator.

Mit dem Feld „Typ“ können Sie den Typ Ihres Edukts verändern. Die Standardauswahl ist „Edukt“. Weitere Möglichkeiten sind: Reagenz, Katalysator, Lösungsmittel. Abhängig von der ensochemLab- Konfiguration stehen Ihnen vordefinierte Auswahllisten für Katalysatoren und Lösungsmittel zur Verfügung.

Alternativ dazu besteht auch die Möglichkeit für alle Edukttypen Daten aus einer Reagenzien-Datenbank zu übernehmen. Aus dieser Reagenzien-Datenbank können chemische Struktur, Molekulargewicht, Dichte, CAS-Nummer, Herkunft etc. übernommen werden. Weitere Informationen zur Reagenzien-Datenbank finden Sie in Kapitel 19.

Das Feld „Stöc. Faktor“ dient zur Angabe eines stöchiometrischen Faktors, der in die Berechnungen einbezogen wird.

Die Seite sieht nun so aus:



Falls Sie das ausgewählte Edukt schon einmal synthetisiert und als Produkt eines anderen Experiments in die Datenbank eingegeben haben, können Sie dessen Experimentnummer in das Feld „Ref-Experiment“ eingeben oder mit einem Klick auf die Lupe an rechts neben dem Feld über die Struktur danach suchen.

Sie können Ihre Edukte verändern, ohne zur Reaktionsseite zurückkehren zu müssen. Doppelklicken Sie einfach auf eine Struktur und das gewählte Edukt lässt sich im von Ihnen eingestellten Editor bearbeiten. Die hier vorgenommenen Änderungen werden automatisch in die Reaktion übernommen.

Sie können die Reihenfolge Ihrer Edukte mit Hilfe der grünen Pfeile in der Symbolleiste ändern. Wenn Sie zur Seite „Reaktion“ zurückkehren würden, könnten Sie sehen, dass die Reaktion automatisch entsprechend angepasst wurde.

Es ist auch möglich, ein neues Edukt einzufügen, indem Sie auf den Knopf „Neues Edukt“ in der Symbolleiste klicken. Dabei wird ein leeres Edukt ohne Daten in Ihr Experiment eingefügt. Wenn Sie an dieser Stelle zur Reaktionsseite zurückblättern würden, könnten Sie es dort jedoch noch nicht sehen, da es noch keine Struktur hat. Mit dem bereits erwähnten Doppelklick auf der Strukturbox können Sie eine solche einfügen.

Mit dem Knopf „Edukt löschen“ können Sie ein bestehendes Edukt löschen. Auch in diesem Fall ändert ensochemLab automatisch die Reaktion.

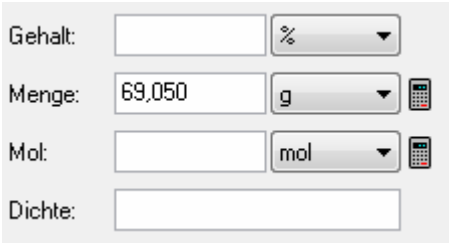
Wenn Sie über keine Struktur verfügen, können Sie die Summenformel auch manuell angeben und danach auf das Taschenrechnersymbol neben dem Eingabefeld klicken. ensochemLab berechnet nun automatisch die zugehörige Molare Masse.

Nun wird es Zeit, einen Blick auf die in ensochemLab integrierten Rechenfunktionen zu werfen, wobei wir unsere bereits eingegebene Beispielreaktion als Grundlage verwenden:

Aus einer Versuchsvorschrift ist uns bekannt:

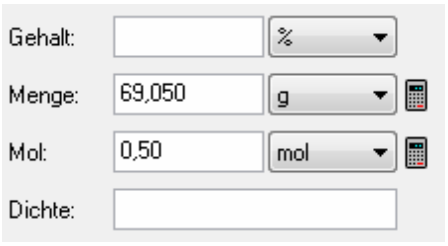
Einwaage Salicylsäure:	69,05 g
Einwaage Essigsäureanhydrid:	51,05 g

Daraus berechnen wir zunächst die Molzahl:



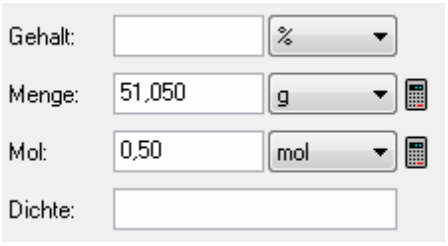
Geben Sie die Menge 69,05 ein und wählen Sie aus dem Feld „Einheit“ das Element „g“ aus.

Klicken Sie nun auf das aktive Symbol neben dem Feld „Mol“ und ensochemLab wird automatisch die Molzahl berechnen. Die Anzahl der anzuzeigenden Dezimalstellen können Sie in den Programmeinstellungen verändern. Darauf wird ein späteres Kapitel näher eingehen.



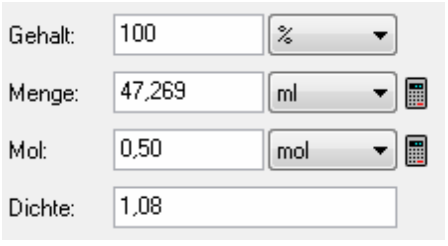
69,05 g Salicylsäure entsprechen 0,5 mol

Analog können Sie nun die Molzahl für das zweite Edukt berechnen:



51,05 g Essigsäureanhydrid entsprechen 0,5 mol

Wenn ein Edukt in Lösung vorliegt, kommt das Feld „Gehalt“ ins Spiel. Sie können den Gehalt in [%], [mol/l] oder [mmol/l] angeben. Für den Fall, dass der Gehalt in [mol/l] angeben wird, die Menge in [g] berechnet werden soll und im Feld „Dichte“ kein Wert gefunden wird, rechnet ensochemLab mit der Dichte 1 [g/l].



Geben Sie als Gehalt 100 ein und wählen Sie dafür die Einheit „%“ aus (Reinsubstanz). Behalten Sie die Menge und Molzahl aus dem vorherigen Beispiel bei, ändern Sie die Dichte jedoch auf „1,08“ und klicken die dann auf den Taschenrechner neben dem Feld „Menge“: Diese beträgt nun nur noch 47,269 ml.
Auf der Berechnungsseite finden Sie das Feld Volumen. Dort können Sie das Volumen parallel zur Masse verwenden.

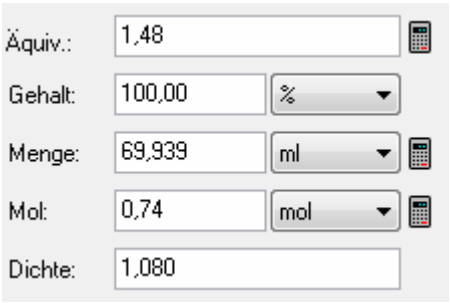
Anmerkung:	Die angegebene Menge bezieht sich nicht auf die gelöste Stoffmenge, sondern auf die Gesamtmenge der Lösung.

ensochemLab kann außerdem mit Äquivalenten rechnen. Dazu müssen Sie ein Edukt als Bezugs-Edukt festlegen. Markieren Sie es dazu in der Auswahlliste und klicken Sie auf den Knopf „Pfeil nach rechts“ in der Symbolleiste. Dem Bezugs-Edukt wird automatisch ein Äquivalent von 1 zugeordnet. In unserem Beispiel empfiehlt es sich, die Salicylsäure als Bezugs-Edukt zu verwenden.

Um mit Äquivalenten rechnen zu können, muss die entsprechende Option in Ihren Benutzereinstellungen aktiviert sein. Ist dies nicht der Fall, wird anstelle des Äquivalent-Felds ein Feld für Mol Prozente angezeigt. Mit diesem können Sie jedoch ganz analog rechnen.

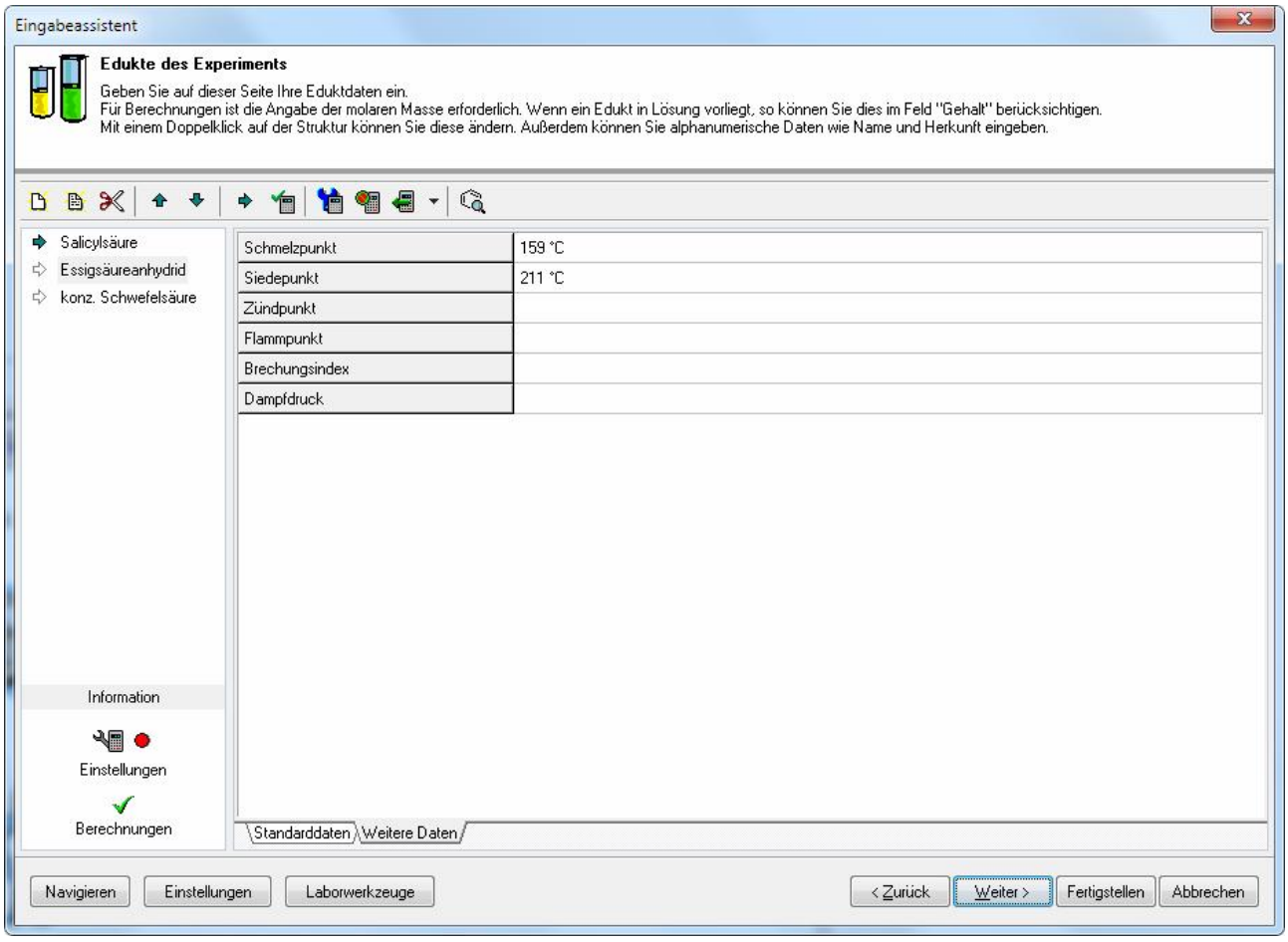
Wenn Sie Ihre Einstellungen ändern möchten, müssen Sie den Eingabeassistenten hierfür nicht verlassen. Klicken Sie einfach auf den Knopf „Einstellungen“ am unteren Rand des Fensters.

Wählen Sie nun das Essigsäureanhydrid aus und leeren die Felder Menge und Mol. Geben Sie „1,48“ ein und klicken Sie dann auf das Taschenrechnersymbol:



ensochemLab hat nun Menge und Molzahl entsprechend dem Äquivalent berechnet. Die Ausbeute der Reaktion werden wir bei den Produkten berechnen.

Wir haben uns bisher nur auf der abgeteilten Seite „Standarddaten“ bewegt. Zusätzlich unterstützt ensochemLab auch die Eingabe weiterer (zum Beispiel chemisch-physikalischer) Daten. Klicken Sie dazu auf den Karteireiter „Weitere Daten“:



Hier können Sie für eine Reihe von Datenfeldern weitere Werte angeben. Um einen Eintrag in der Tabelle zu bearbeiten, klicken Sie bitte mit der Maus auf die entsprechende Spalte oder navigieren Sie mit den Pfeiltasten Ihrer Tastatur dorthin. Klicken Sie danach hinein bzw. drücken Sie die Eingabetaste.
Die Eingabemöglichkeiten hängen vom jeweils gewählten Feld ab. Möglich sind folgende Feldtypen:

- **Textfelder**
  Diese Felder können jeden beliebigen Text enthalten. Auch Zahlen und Sonderzeichen sind möglich. Sie können die Daten mit einer normalen Textdatei vergleichen.
- **exakte Zahlenfelder**
  Diese Felder können nur Zahlen oder Fließkommawerte enthalten. Je nach Art der Daten kann in einigen Fällen außerdem eine Einheit und / oder eine Bedingung eingegeben werden (z.B. 12,5 °C bei Raumtemperatur)
- **Bereichsfelder**
  Diese Felder enthalten einen Zahlenbereich oder einen Bereich von Fließkommawerten. Auch Einheiten und Temperaturen sind entsprechend den exakten Zahlen mitunter möglich.
- **Nachschlagefelder**
  Diese Felder erlauben dem Anwender aus einer Liste von vordefinierten Werten zu wählen. Je nach Definition ist die Eingabe von Freitext ebenfalls möglich.
- **Link**
  Diese Felder erlauben dem Anwender Eingaben analog dem eines Textfeldes. Der Inhalt wird allerdings als Hyperlink angesehen der durch Anklicken oder per Kontextmenü im Browser geöffnet werden kann.

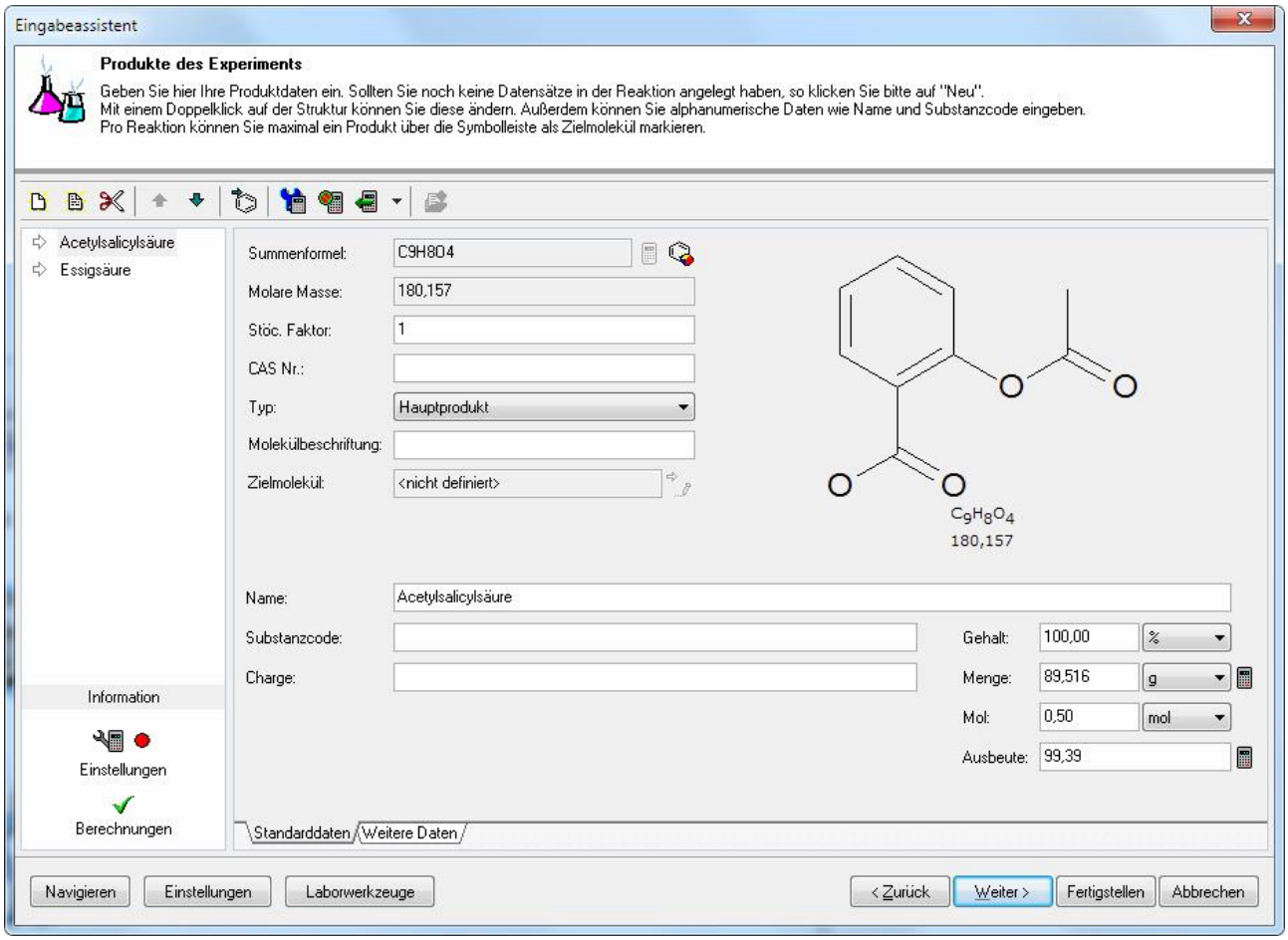
Bitte beachten Sie, dass die Datenfelder vom Administrator definiert werden. Er kann neue Felder hinzufügen, den Namen oder den Typ von bestehenden Feldern verändern und weitere Optionen festlegen. Er kann auch sprachabhängige Synonyme angeben, die anstelle der Standardwerte in der Installationssprache der Datenbank verwendet werden.

Es ist an dieser Stelle nicht möglich, weitere Datenfelder zu definieren. Wenn Sie weitere Felder benötigen, wenden Sie sich bitte an Ihren Administrator.

Wenn Sie übrigens ein neues Edukt anlegen möchten, das sich nur in einigen Datenfeldern von einem bestehenden Edukt unterscheidet, müssen Sie nicht alles erneut eingeben. Mit einem Klick auf „Kopieren“ können Sie den aktuell ausgewählten Datensatz duplizieren. Bitte beachten Sie jedoch, dass hierbei keine Daten in die Zwischenablage kopiert werden und somit auch das manuelle Einfügen an anderer Stelle nicht möglich ist.

3.4. Produkte

Klicken Sie nun auf „Weiter“, um zur Produktseite zu wechseln. Diese Seite befasst sich mit den Produkten und ähnelt stark der Eduktseite:



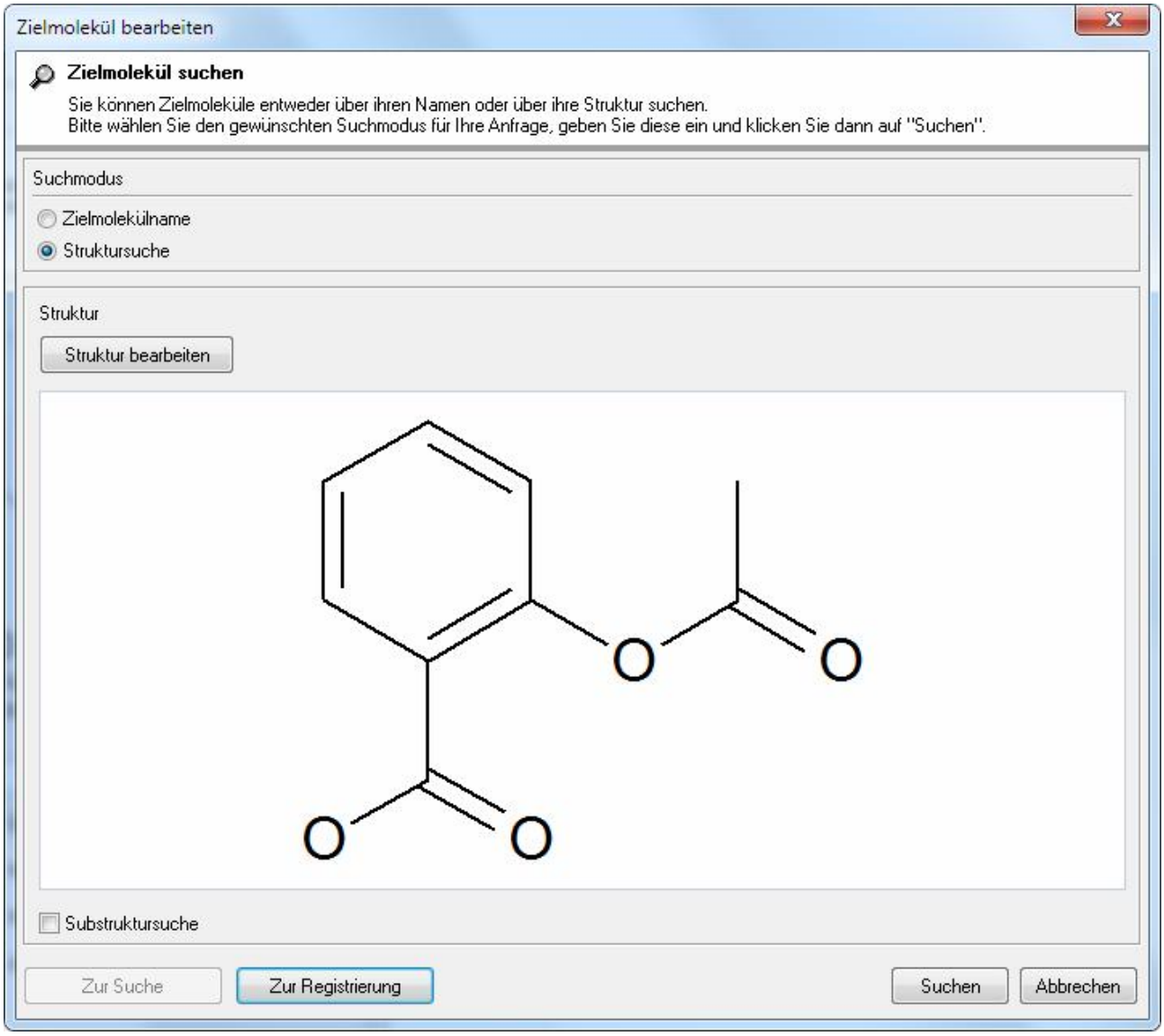
Die Auswahl eines Produkts wird auch hier auf der linken Seite vorgenommen und die Eingabe bzw. Änderung der Daten erfolgt auf der rechten Fensterseite, die wie bereits gewohnt, in Standarddaten und weitere Daten unterteilt ist.

Im Feld „Typ“ können Sie zwischen Haupt- und Nebenprodukt wählen. In diesem Beispiel definieren wir die Acetylsalicylsäure als Haupt- und die Essigsäure als Nebenprodukt.

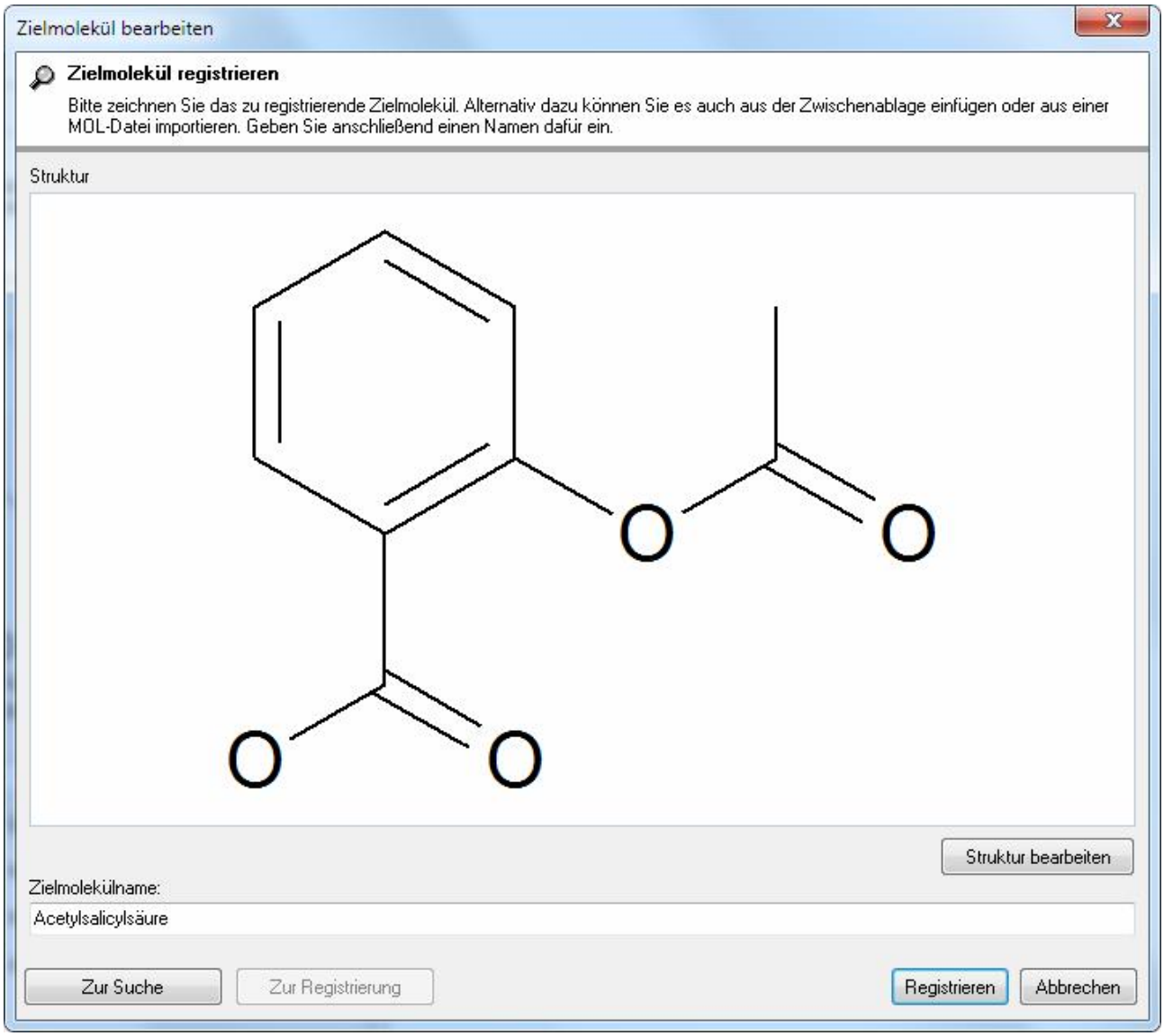
Als nächstes definieren wir unser Hauptprodukt als Zielmolekül. Klicken Sie dazu bitte in der Symbolleiste auf die Schaltfläche „Als Zielmolekül setzen“

ensochemLab sucht nun automatisch nach der Produktstruktur. Wird Sie nicht gefunden, können Sie entweder eine benutzerdefinierte Suche in der Liste der bestehenden Zielmoleküle durchführen oder ein neues Zielmolekül registrieren.

Falls Sie sich für eine Suche entscheiden, wählen Sie bitte, ob Sie nach einem Namen bzw. Synonym oder nach einer Struktur suchen möchten. Geben Sie dann den Namen ein bzw. zeichnen Sie die gewünschte Suchstruktur (in den Editor gelangen Sie entweder mit einem Doppelklick auf dem Strukturfeld oder über den Knopf „Struktur bearbeiten“) oder importieren Sie über das Kontextmenü eine Suchanfrage aus einer MOL Datei auf Ihrer lokalen Festplatte. Klicken Sie anschließend auf „Suchen“:



Dieses Handbuch geht davon aus, dass Sie noch nicht über Zielmoleküle verfügen. Klicken Sie daher bitte auf den Knopf „Zur Registrierung“. Bevor ensochemLab die aktuelle Struktur jedoch als Zielmolekül registrieren kann, müssen Sie noch einen ersten Namen dafür eingeben. Der Eingabe weiterer Synonyme werden wir uns später widmen.

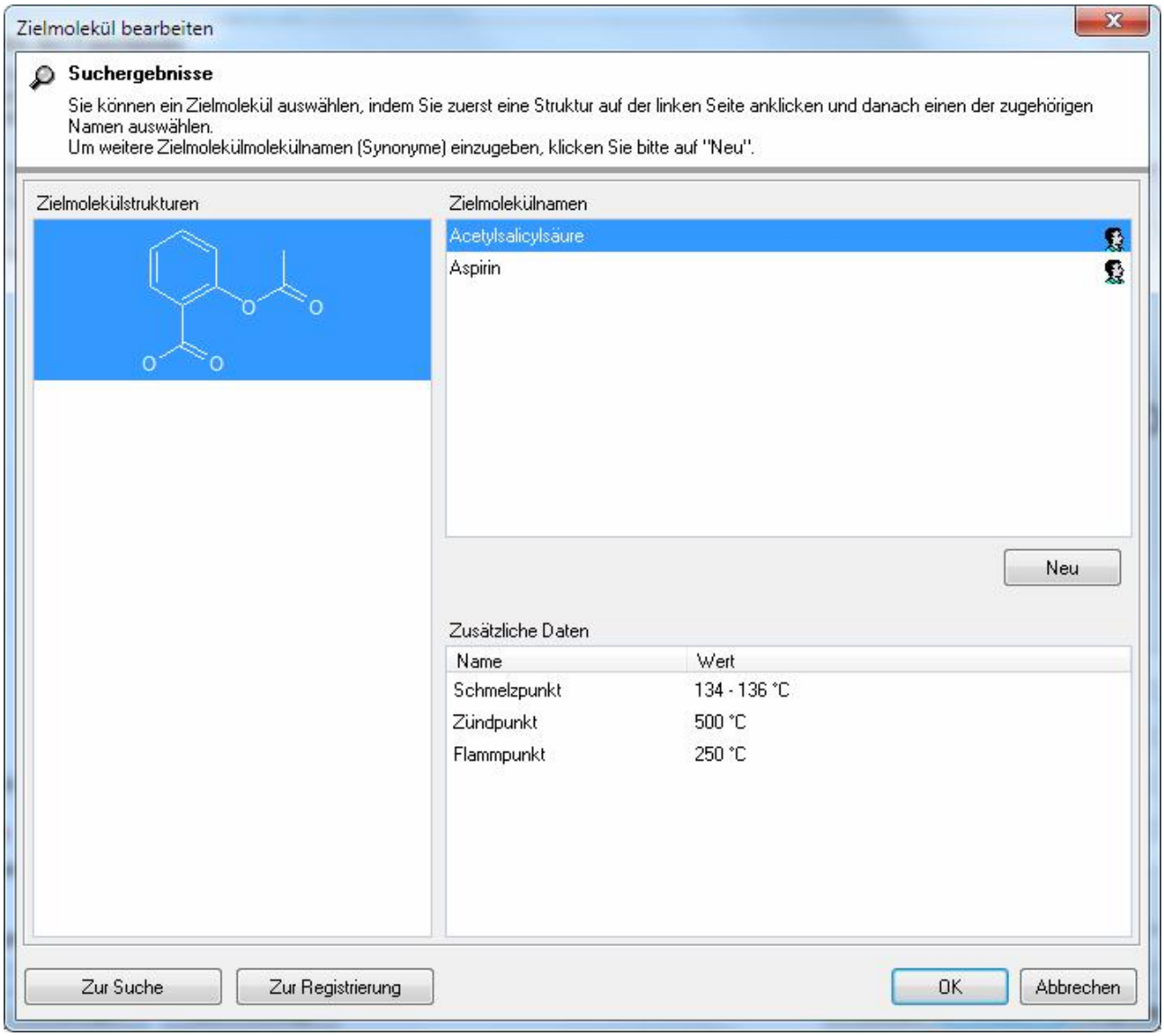


Sollten Sie doch lieber eine Suche durchführen wollen, können Sie mit einem Klick auf „Zur Suche“ bequem zur vorherigen Suchseite zurückkehren.

Auch auf dieser Seite können Sie die Struktur noch ändern. Das Öffnen des Chemieeditors erfolgt völlig analog zur vorherigen Seite. Auch ein Import aus einer MOL Datei ist wieder möglich. Nach einem Klick auf „Registrieren“ wird das Zielmolekül gespeichert und in Ihr Experiment übernommen.

Natürlich ist die Registrierung bzw. Angabe eines Zielmoleküls optional. Sie können ein Experiment auch ohne Zielmolekül speichern. Dies ist zum Beispiel dann sinnvoll, wenn es sich um eine Zwischenstufe für eine Experimentreihe handelt.

Da ein Zielmolekül wie bereits angedeutet beliebig viele Namen (Synonyme) besitzen kann, können Sie eines dafür als anzuzeigenden Text in Ihrem Experiment auswählen. Um den aktuellen Namen zu ändern, klicken Sie bitte im Eingabeassistenten auf den Knopf „Zielmolekül bearbeiten“ rechts neben dem aktuellen Namen des Zielmoleküls. Mit diesem Knopf können Sie außerdem auch ein anderes Zielmolekül für Ihre Reaktion auswählen. Das folgende Fenster erscheint:



Um ein neues Zielmolekül als Solches auszuwählen, klicken Sie bitte auf den Knopf „Zur Suche“. Sie gelangen damit zur bereits besprochenen Suchseite. Nachdem Sie die Suche ausgeführt haben, kehren Sie zur aktuellen Seite zurück. In der linken Liste werden die Strukturen aller gefundenen Zielmoleküle aufgelistet.

Wenn Sie keine Suche durchführen, enthält die linke Liste nur Ihr aktuelles Zielmolekül. Nachdem Sie auf einen Eintrag geklickt haben, sehen Sie in der rechten oberen Liste alle zurzeit definierten Bezeichnungen für das Zielmolekül. Die rechte untere Liste beinhaltet zusätzliche Daten, die der Administrator für das Zielmolekül definiert hat. Bitte beachten Sie jedoch, dass diese zusätzlichen Daten nicht nur vom Zielmolekül selbst, sondern auch von seinem gerade ausgewählten Namen abhängen.

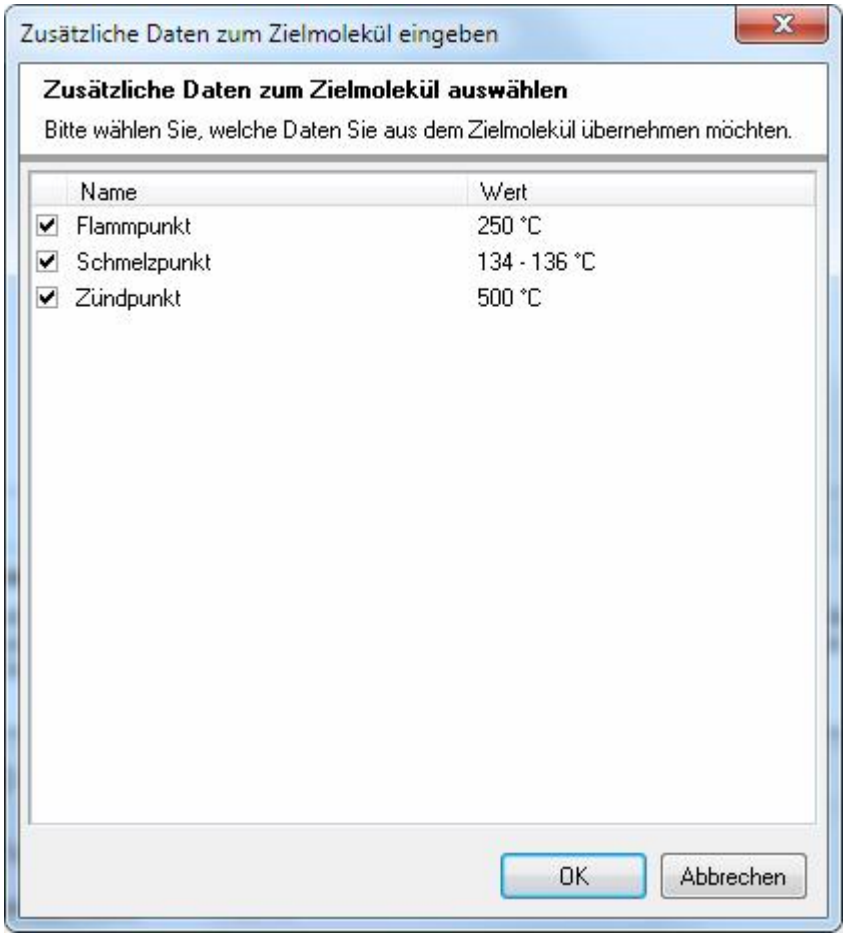
Zu jedem Zielmolekülnamen sehen Sie außerdem am rechten Rand der Liste noch ein Informationssymbol. Wenn Sie die Maus über dieses Symbol bewegen, erscheint ein Hinweisfenster, aus dem Sie den Besitzer sowie das Erstellungsdatum des Zielmolekülnamens entnehmen können.

Um eine neue Bezeichnung einzugeben, klicken Sie bitte auf den Knopf „Neu“.

Anmerkung:	Aus Sicherheitsgründen können Zielmoleküle und Synonyme nur im gesonderten Administrationsdialog bearbeitet und gelöscht werden. Falls Sie einen Datensatz löschen möchten, wenden Sie sich bitte an Ihren Administrator.

Sie können auch nachträglich ein anderes Zielmolekül anlegen, indem Sie im Auswahldialog einfach auf „Zur Registrierung“ klicken. Sie gelangen dabei zur bereits besprochenen Registrierungsseite.

Wenn das von Ihnen ausgewählte Zielmolekül zusätzliche Daten enthält, können Sie diese bei der Rückkehr in den Experimentassistenten in Ihr Produkt übernehmen. Hierfür wird in einem solchen Fall automatisch der folgende Dialog angezeigt:



In der Liste sehen Sie noch einmal die verfügbaren zusätzlichen Daten. Um einen Eintrag zur Übernahme auszuwählen, kreuzen Sie ihn bitte an. Wenn Sie nicht möchten, dass ein Datenfeld übernommen wird, entfernen Sie bitte den entsprechenden Haken. Standardmäßig sind alle Einträge ausgewählt.

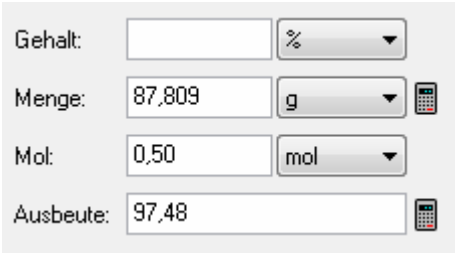
Bitte beachten Sie, dass Sie an dieser Stelle keine Einträge ändern können. Änderungen an den Daten der Zielmoleküle sind nur Administratoren in einem gesonderten Dialog möglich, die Daten des Produkts können nach der Übernahme im Experimentassistenten aktualisiert werden.

Mit einem Klick auf „OK“ werden die Daten übertragen, bei einem Klick auf „Abbrechen“ wird lediglich das Zielmolekül gesetzt, es findet aber keine Übertragung der zusätzlichen Daten statt.

Nach Ihrer Rückkehr in den Eingabeassistenten hat sich die Schaltfläche „Als Zielmolekül setzen“ verändert zu „Zielmolekül abwählen“. Damit können Sie die Referenz Ihres Experiments auf das Zielmolekül wieder löschen. Das Zielmolekül selbst ist davon nicht betroffen.

An dieser Stelle können Sie auch die Ausbeute berechnen. Dies ist natürlich nur dann möglich, wenn ein Edukt als Bezugsgröße fungiert und dieses Edukt auch die benötigten Daten (Menge, etc.) bereitstellt.

Geben Sie für das Beispiel den Wert „87,8“ in das Feld „Menge“ ein, wählen Sie die Einheit „g“ aus und klicken Sie danach auf den Taschenrechner neben dem Feld „Ausbeute“.



0,5 Mol Salicylsäure reagiert zu 0,5 Mol Acetylsalicylsäure.

Gleiches können Sie für das zweite Produkt tun.

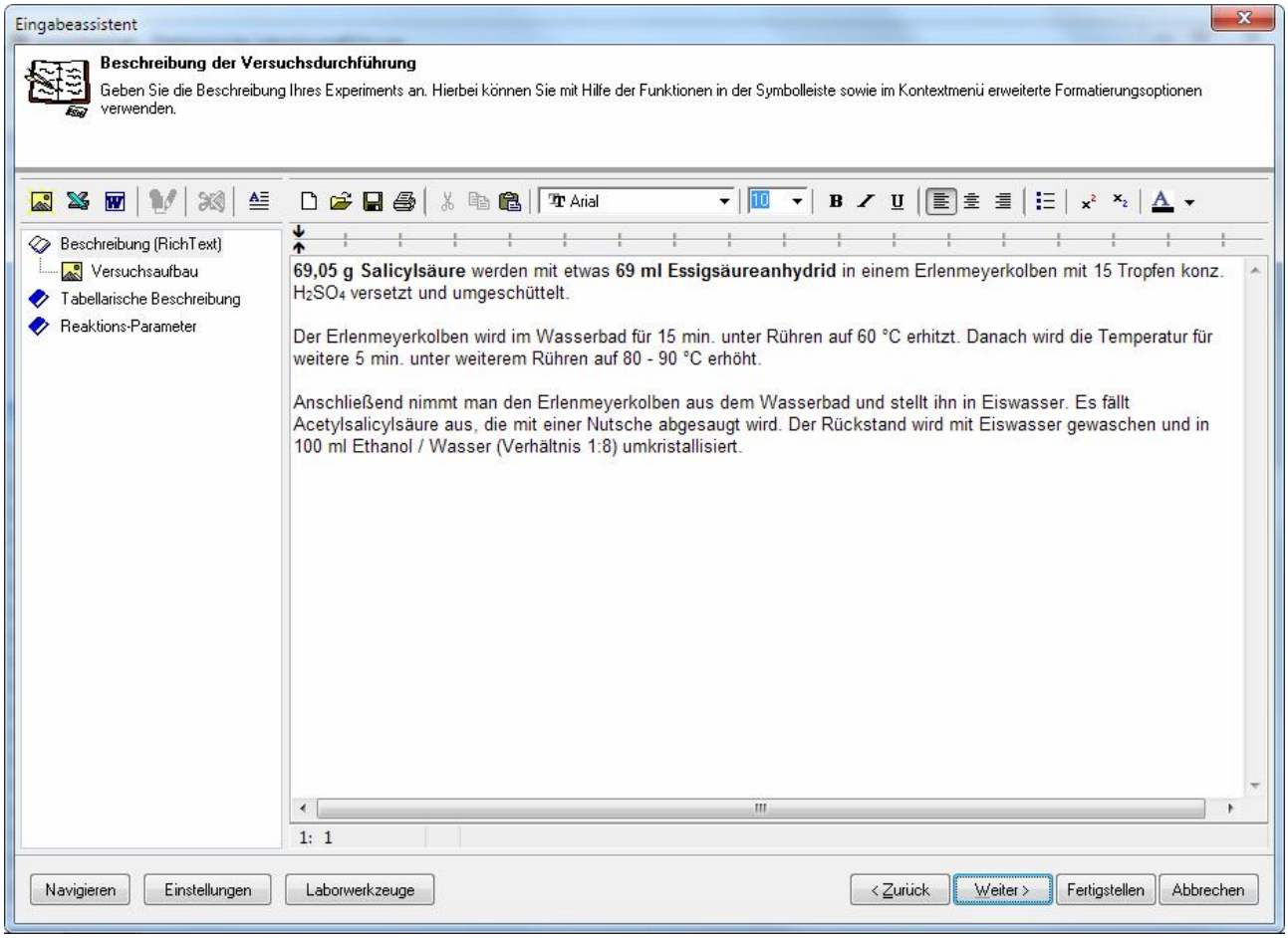
Anmerkung:	Wenn Sie mit Trägersubstanzen arbeiten, selektieren Sie einfach die Auswahlfläche „Auf Trägersubstanz“. Weitere Felder zur Eingabe der zugehörigen Daten werden erscheinen.

Klicken Sie nun auf „Weiter“, um mit der nächsten Seite fortzufahren.

3.5. Beschreibung

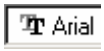
Die folgende Seite wird zur Eingabe der Beschreibung eines Experiments verwendet. Auf der linken Seite können Sie den gewünschten Typ der Beschreibung auswählen.

3.5.1. Beschreibung (Rich Text)


Eingabeassistent
Beschreibung der Versuchsdurchführung
Geben Sie die Beschreibung Ihres Experiments an. Hierbei können Sie mit Hilfe der Funktionen in der Symbolleiste sowie im Kontextmenü erweiterte Formatierungsoptionen verwenden.
Arial
Beschreibung (RichText)
Versuchsaufbau
Tabellarische Beschreibung
Reaktions-Parameter
69,05 g Salicylsäure werden mit etwas 69 ml Essigsäureanhydrid in einem Erlenmeyerkolben mit 15 Tropfen konz. H2SO4 versetzt und umgeschüttelt.
Der Erlenmeyerkolben wird im Wasserbad für 15 min. unter Rühren auf 60 °C erhitzt. Danach wird die Temperatur für weitere 5 min. unter weiterem Rühren auf 80 - 90 °C erhöht.
Anschließend nimmt man den Erlenmeyerkolben aus dem Wasserbad und stellt ihn in Eiswasser. Es fällt Acetylsalicylsäure aus, die mit einer Nutsche abgesaugt wird. Der Rückstand wird mit Eiswasser gewaschen und in 100 ml Ethanol / Wasser (Verhältnis 1:8) umkristallisiert.
1: 1
Navigieren
Einstellungen
Laborwerkzeuge
< Zurück
Weiter >
Fertigstellen
Abbrechen

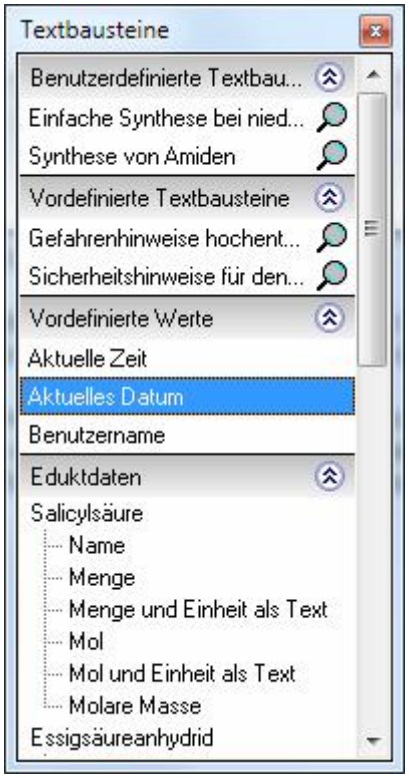
Wählen Sie Beschreibung (RichText) um Texte eingeben zu können, wie Sie es von Textverarbeitungsprogrammen (z.B. Microsoft WordPad, OpenOffice, etc.) gewohnt sind. Die Schalterleiste bietet Ihnen dabei die jeweils möglichen Funktionen an. Für die Textbeschreibung sind dies:

	Neues Dokument	Dies Löscht den Inhalt des Textfeldes
	Datei öffnen	Mit dieser Funktion können Sie eine RTF-Datei von Festplatte einlesen. Bitte beachten Sie, dass manche Programme erweiterte Informationen in RTF Dateien speichern, die ensochemLab beim Einlesen nicht übernimmt (z.B. Bilder) oder anders darstellt.
	Datei speichern	Dies speichert Ihre Versuchsbeschreibung als RTF-Datei auf Festplatte
	Datei drucken	Dies druckt die Versuchsbeschreibung. Hierbei wird grundsätzlich der gerade eingestellte Standarddrucker verwendet.
	Ausschneiden	Diese Funktion ist nur aktiv, wenn ein Text markiert ist. Sie kopiert die Markierung in die Zwischenablage und löscht sie aus dem Text

	Kopieren	Diese Funktion ist nur aktiv, wenn ein Text markiert ist. Sie kopiert die aktuelle Auswahl in die Zwischenablage.
	Einfügen	Diese Funktion fügt den aktuellen Inhalt der Zwischenablage in Ihre Versuchsbeschreibung ein
	Schriftart	In dieser Liste können Sie die verwendete Schriftart ändern. Einzelne Textabschnitte können verschiedene Schriftarten haben. Falls das Experiment auf einem Computer angezeigt wird, der nicht über diese Schriftart verfügt, wird stattdessen eine Standardschrift verwendet.
	Schriftgröße	Aus dieser Liste können Sie die Schriftgröße für einen Textabschnitt aus der Liste auswählen oder manuell eingeben. Diese wird genau wie in Textverarbeitungsprogrammen immer in „Punkt“ angegeben.
	Fettdruck	Der ausgewählte Text wird in Fettschrift angezeigt
	Kursiv	Der ausgewählte Text wird kursiv angezeigt
	Unterstrichen	Der ausgewählte Text wird unterstrichen
	Links ausrichten	Der aktuelle Absatz wird linksbündig ausgerichtet
	Zentrieren	Der aktuelle Absatz wird zentriert ausgerichtet
	Rechts ausrichten	Der aktuelle Absatz wird rechtsbündig ausgerichtet
	Aufzählung	Diese Funktion fügt eine Aufzählung in die Versuchsbeschreibung ein
	Hochstellung	Der ausgewählte Text wird hochgestellt
	Tiefstellung	Der ausgewählte Text wird tiefgestellt
	Schriftfarbe	Anhand einer Farbauswahl kann der Text entsprechend verändert werden. Sie können sowohl die Standard Farbskala als auch eigene Werte nutzen.

Über das Kontextmenü können Sie auch Edukt- und Produktdaten in Ihre Versuchsbeschreibung einfügen. Betrachten Sie dazu einfach die Untermenüs „Eduktdaten“ und „Produktdaten“, wo Sie die entsprechenden Funktionen finden. Mit dem Menü „Vordefinierte Werte“ können Sie aktuelle Werte wie Datum und Uhrzeit einfügen. Bitte beachten Sie jedoch, dass alle diese Werte nur kopiert, nicht aber verknüpft werden. Ändern Sie also nachträglich zum Beispiel die Menge eines Edukts, wird der Text der Versuchsbeschreibung nicht angepasst.

Mit einem Klick auf „Textbausteinfenster anzeigen“ können Sie ein Auswahlfenster für eigene und vom Administrator vordefinierte Textbausteine öffnen. Ein Textbaustein ermöglicht Ihnen, häufig verwendete Formulierungen und Textteile bequem einzufügen, ohne Sie jedes Mal neu eingeben zu müssen. Das Fenster sieht wie folgt aus:



Im oberen Teil finden Sie Ihre persönlichen Textbausteine, unabhängig davon, ob diese als öffentlich oder privat markiert wurden. Der nächste Bereich enthält die vom Administrator vordefinierten Textbausteine.

Um einen Textbaustein an der aktuellen Cursorposition einzufügen, doppelklicken Sie einfach auf dem entsprechenden Eintrag in der Liste. Alternativ dazu können Sie ihn auch auswählen und danach auf „Textbaustein einfügen“ im Kontextmenü klicken. Auch ein Einfügen per Drag & Drop ist möglich.

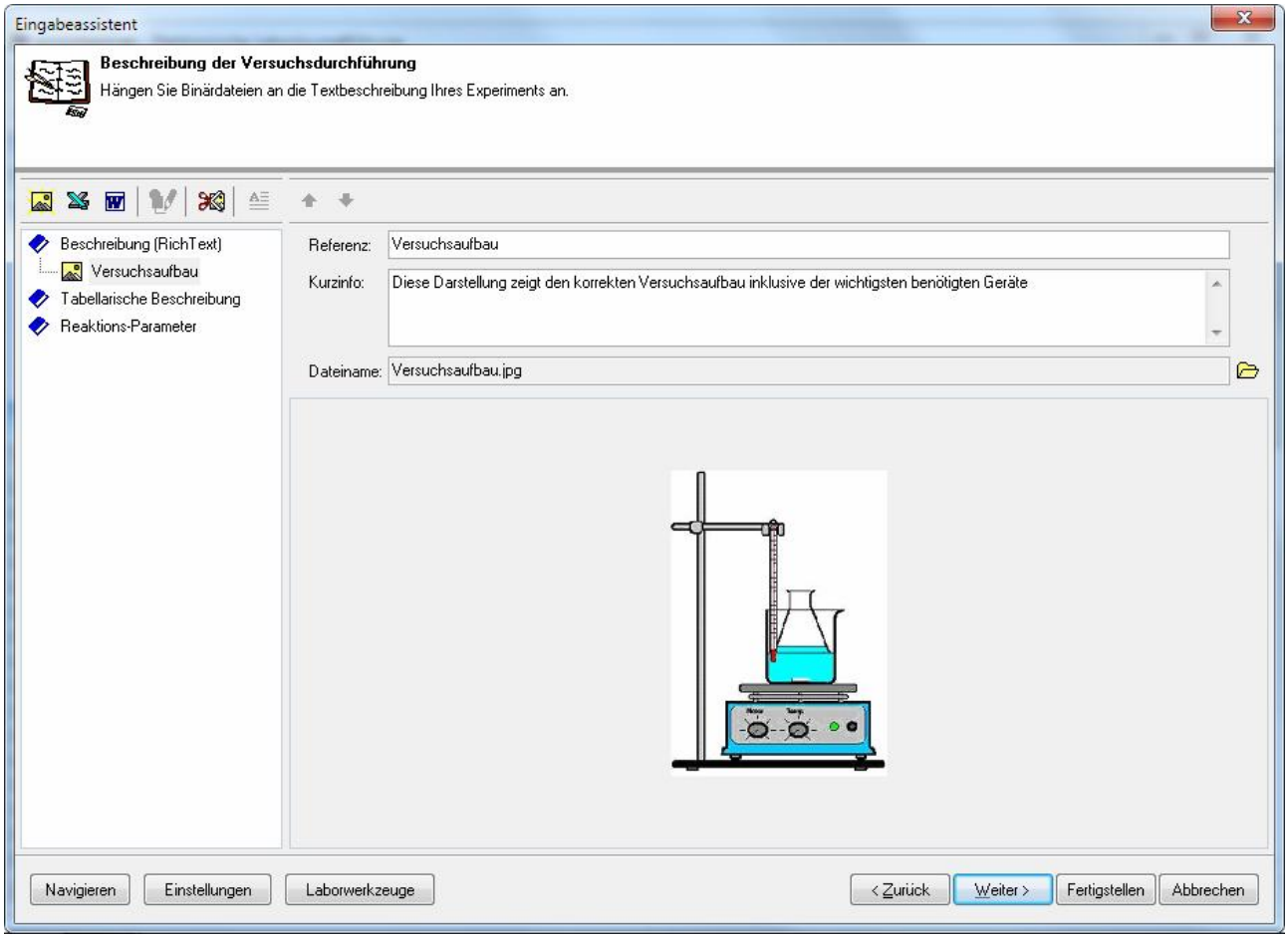
Um die Reihenfolge der Textbausteinbereiche zu vertauschen, also z.B. die vordefinierten Texte nach oben zu bewegen, können Sie die Funktion „Textbausteinblöcke vertauschen“ des Kontextmenüs verwenden.

Mit dem Befehl „Textbausteine bearbeiten“ öffnen Sie den Verwaltungsdialog für Ihre persönlichen Textbausteine, wo automatisch die aktuelle Auswahl zur Bearbeitung selektiert wird. Diese Funktion steht nur für eigene Texte zur Verfügung. Der Verwaltungsdialog wird im Kapitel „Benutzerdefinierte Textbausteine“ ausführlich erläutert.

Neben den reinen Textbausteinen finden Sie noch weitere Daten im Textbausteinfenster. Dazu zählen allgemeine Werte wie das aktuelle Datum aber auch experimentbezogene Werte der einzelnen Edukte und Produkte (Name, Menge usw.), die sich entsprechend gruppiert im unteren Bereich des Fensters befinden. Sie können mit diesen Werten genau arbeiten wie mit einem Textbaustein.

Um direkt aus der aktuellen Versuchsbeschreibung heraus einen neuen Textbaustein zu erstellen, markieren Sie bitte den gewünschten Text und wählen Sie dann im Kontextmenü die Funktion „Auswahl als neuer Textbaustein“ aus. Sie werden nun zur Eingabe eines Namens aufgefordert. Nach einem Klick auf „OK“ wird der neue Textbaustein gespeichert.

Mit Knopf „Binärdatensatz anlegen“ (ganz links) können Sie ähnlich wie bei einer E-Mail weitere Daten an Ihre Durchführungsbeschreibung anhängen. Dieser Anhang kann ein Bild, ein PDF Dokument oder jede andere Art von Datei sein. An eine Beschreibung können beliebig viele dieser Anhänge angefügt werden.



Für jeden Anhang (Binärdatensatz) können Sie eine Referenz und eine Kurzbeschreibung eingeben. Eine Datei muss immer ausgewählt werden. Klicken Sie dazu auf den Knopf „Datei öffnen“. Es erscheint ein „Öffnen“ Dialog, in dem Sie die Datei über Speicherort und Namen auswählen können.

Sollten die gewünschten Dateien in der Auswahl nicht angezeigt werden, klicken Sie bitte im Feld „Dateitypen“ auf „Alle Dateien“. Diese Dateien können unter Umständen jedoch von ensochemLab nicht direkt angezeigt werden und müssen zur Betrachtung in ein externes Anzeigeprogramm geladen werden. Ob eine interne Anzeige möglich ist erkennen Sie auch daran, ob Sie hier im Eingabeassistenten ein Vorschaubild oder nur einen kurzen Hinweistext erhalten.

Um eine importierte Binärdatei wieder auf Festplatte abzuspeichern, klicken Sie bitte mit der rechten Maustaste auf das Vorschaubild und dann auf „Binärdatei speichern“:

Word Dokumente und Excel Arbeitsmappen können mit den jeweiligen Knöpfen in der Symbolleiste direkt in ensochemLab erstellt werden. Diese Dateien können auch in der Experimentanzeige als Vorschau angezeigt werden. Beim Ausdruck werden sie wie Bilder in das Dokument eingebettet. Natürlich können Sie auch eine Word- oder Excel-Datei aus einer externen Quelle importieren.

Mit einem Doppelklick auf der Vorschau im Experimentassistenten können Sie direkt Änderungen an solchen Office-Dokumenten vornehmen, ohne die Datei jedes Mal neu importieren zu müssen.

Bitte beachten Sie, dass zur Nutzung dieser Funktionen die entsprechenden Microsoft Office Anwendungen auf Ihrem lokalen Computer installiert sein müssen. Ist dies nicht der Fall, können Sie Office Dokumente nur als normale Binärdateien unbekannten Typs anhängen.

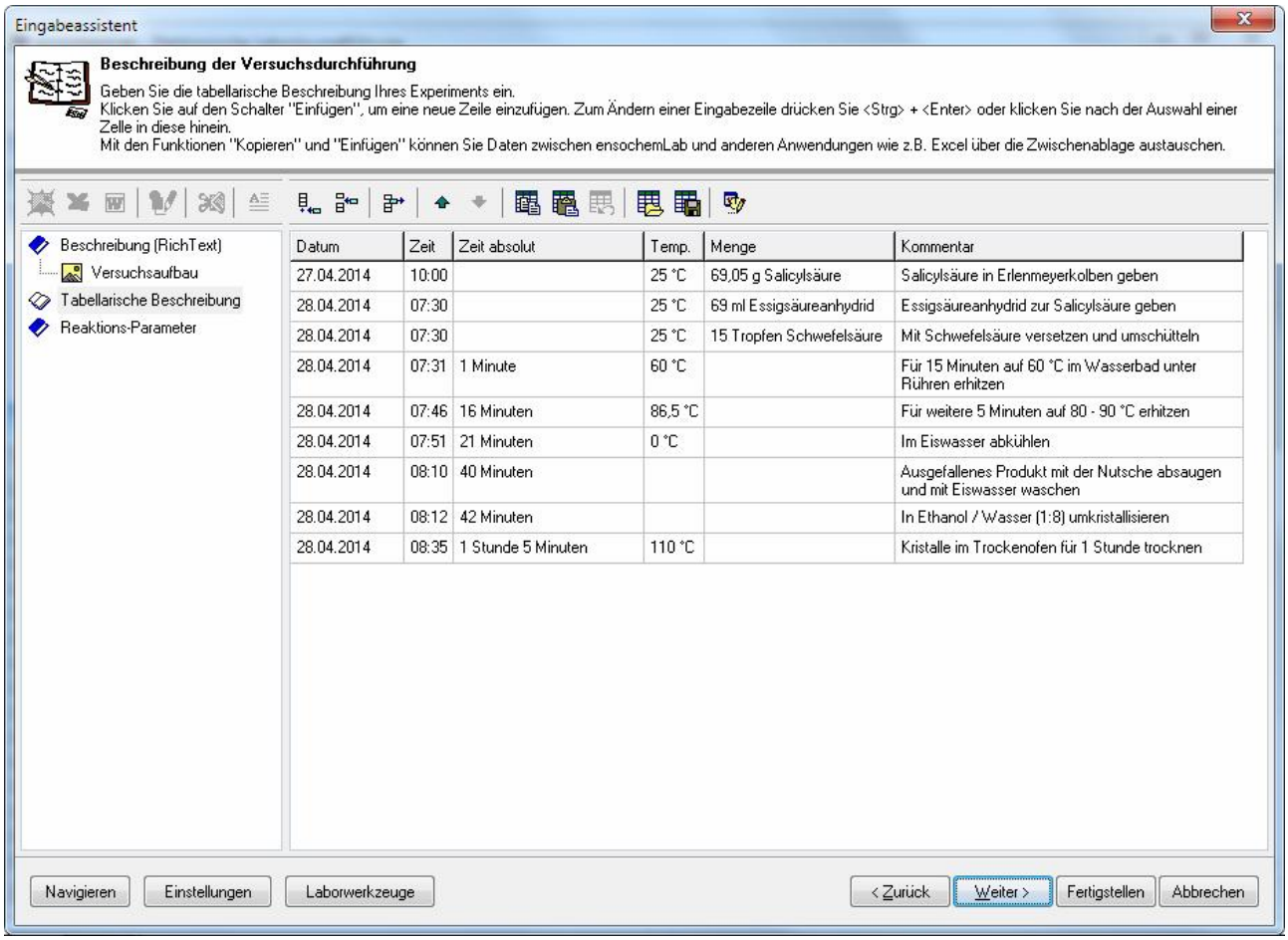
Falls keine Office-Dokumente angezeigt werden und auch die Funktionen zum Erstellen neuer Dokumente nicht verfügbar sind, ist diese Funktion eventuell in Ihren persönlichen Einstellungen deaktiviert. Nähere Informationen hierzu finden Sie im Kapitel „Anpassen Ihrer Einstellungen“ in diesem Handbuch.

Wenn Sie ein PDF- oder Word-Dokument oder eine Excel-Arbeitsmappe auswählen, können Sie zwischen den einzelnen Seiten Ihrer Datei blättern. Hierzu blendet ensochemLab am oberen Rand des Vorschaubereichs eine spezielle Symbolleiste für die Navigation ein:

Mit dem Knopf „Binärdaten löschen“ können Sie einen angehängten Binärdatensatz wieder löschen. An eine Durchführungsbeschreibung können beliebig viele Dateien angehängt werden. Für die Größe der Binärdateien besteht ebenfalls keine programmtechnische Beschränkung.

3.5.2. Tabellarische Beschreibung

In der tabellarischen Beschreibung wird im Allgemeinen der Verlauf der Reaktion dokumentiert, einschließlich Temperaturen, Mengen und Kommentaren jeglicher Art. Sie können allerdings auch jede andere stichpunktartige Dokumentation erstellen, die den zeitlichen Verlauf der Reaktion angibt. In diesem Beispiel dokumentieren wir die Zugabe der Edukte sowie die wesentlichen Veränderungen der Temperatur.


Eingabeassistent
Beschreibung der Versuchsdurchführung
Geben Sie die tabellarische Beschreibung Ihres Experiments ein.
Klicken Sie auf den Schalter "Einfügen", um eine neue Zeile einzufügen. Zum Ändern einer Eingabezeile drücken Sie <Strg> + <Enter> oder klicken Sie nach der Auswahl einer Zelle in diese hinein.
Mit den Funktionen "Kopieren" und "Einfügen" können Sie Daten zwischen ensochemLab und anderen Anwendungen wie z.B. Excel über die Zwischenablage austauschen.
Beschreibung (RichText)
Versuchsaufbau
Tabellarische Beschreibung
Reaktions-Parameter
Datum | Zeit | Zeit absolut | Temp. | Menge | Kommentar
27.04.2014 | 10:00 | | 25 °C | 69,05 g Salicylsäure | Salicylsäure in Erlenmeyerkolben geben
28.04.2014 | 07:30 | | 25 °C | 69 ml Essigsäureanhydrid | Essigsäureanhydrid zur Salicylsäure geben
28.04.2014 | 07:30 | | 25 °C | 15 Tropfen Schwefelsäure | Mit Schwefelsäure versetzen und umschütteln
28.04.2014 | 07:31 | 1 Minute | 60 °C | | Für 15 Minuten auf 60 °C im Wasserbad unter Rühren erhitzen
28.04.2014 | 07:46 | 16 Minuten | 86,5 °C | | Für weitere 5 Minuten auf 80 - 90 °C erhitzen
28.04.2014 | 07:51 | 21 Minuten | 0 °C | | Im Eiswasser abkühlen
28.04.2014 | 08:10 | 40 Minuten | | | Ausgefallenes Produkt mit der Nutsche absaugen und mit Eiswasser waschen
28.04.2014 | 08:12 | 42 Minuten | | | In Ethanol / Wasser (1:8) umkristallisieren
28.04.2014 | 08:35 | 1 Stunde 5 Minuten | 110 °C | | Kristalle im Trockenofen für 1 Stunde trocknen
Navigieren
Einstellungen
Laborwerkzeuge
< Zurück
Weiter >
Fertigstellen
Abbrechen

Sie können direkt in der ersten Zeile mit Ihrer Eingabe starten. Diese Zeile wird von ensochemLab automatisch angelegt. Mit dem Knopf „Zeile hinzufügen“ können Sie eine neue Zeile in die Liste einfügen. Diese wird nach der aktuellen Zeile eingefügt. Dies ist ebenso möglich, wenn Sie am Ende einer bestehenden Zeile auf die Tabulatortaste drücken. Mit der Tabulatortaste gelangen Sie auch in das nächste Eingabefeld. Mit dem Knopf „Zeile einfügen“ können Sie eine neue Zeile vor der aktuellen Zeile einfügen. Der Knopf „Zeile löschen“ löscht die aktuell ausgewählte Zeile.

Pro Experiment sind beliebig viele Zeilen mit tabellarischer Beschreibung möglich, an die jedoch keine Binärdaten angehängt werden können.

Um die Daten einer Zelle zu verändern, können Sie diese entweder mit einem Klick oder den Pfeiltasten Ihrer Tastatur markieren und danach die Eingabetaste drücken. Sie können auch in eine markierte Zelle hineinklicken, um den Bearbeitungsmodus zu öffnen.

Bitte beachten Sie, dass Zeilenumbrüche innerhalb einer Zelle nur im Kommentarfeld möglich sind. Bei anderen Spalten empfehlen wir, eine neue Zeile anzulegen.

Sollten Sie einen zu langen Text eingeben, wird er im Eingabeassistenten mit … abgekürzt. Dabei werden jedoch nicht die eigentlichen Daten abgeschnitten, sondern es wird lediglich die Anzeige verkürzt. In der Experimentdarstellung im Hauptfenster und bei Ausdrucken fügt ensochemLab automatisch entsprechende Umbrüche ein, um alle Daten darstellen zu können.

Die erste Zeile belegt ensochemLab automatisch mit dem aktuellen Datum vor. Bei weiteren Zeilen wird das Datum der jeweils direkt darüber befindlichen Zeile übernommen. So können Sie zum Beispiel einen Versuch von vergangener Woche nachträglich dokumentieren, ohne jedes Mal das Datum ändern zu müssen.

Mit dem Knopf „Nach oben“ schieben Sie eine Zeile Ihrer Beschreibung nach oben. Nach unten bewegt die aktuelle Zeile nach unten.

ensochemLab unterstützt auch den einfachen Datenaustausch mit anderen Programmen. So können Sie zum Beispiel Ihre tabellarische Beschreibung in Excel weiterverarbeiten und dann nach ensochemLab zurück übertragen.

Die Funktion „Kopieren“ kopiert dabei die gesamte Tabelle in die Zwischenablage. Mit „Einfügen“ fügen Sie die Tabelle in der Zwischenablage wieder in ensochemLab ein. Achtung: Ihre aktuelle Tabelle wird hierbei überschrieben. Sollten Sie damit versehentlich Daten importieren, die Sie nicht beibehalten möchten, können Sie die letzte Einfügeoperation mit dem Knopf „Rückgängig“ rückgängig machen.

Sollten die neuen, außerhalb von ensochemLab bearbeiteten Daten mit dem benötigten Datenformat nicht vereinbar sein (z.B. weil sie eine andere Spaltenzahl besitzen oder das Datumsfeld einen anderen Text enthält), erhalten Sie eine entsprechende Fehlermeldung und können entscheiden, ob Sie den Vorgang fortsetzen (dabei verlieren Sie unter Umständen Daten) oder abbrechen möchten.

Sie können die tabellarischen Daten in diesem Modul auch in eine CSV-Datei exportieren bzw. von einer solchen importieren. Nähere Informationen hierzu finden Sie im gesonderten Kapitel „Datenaustausch mit CSV“.

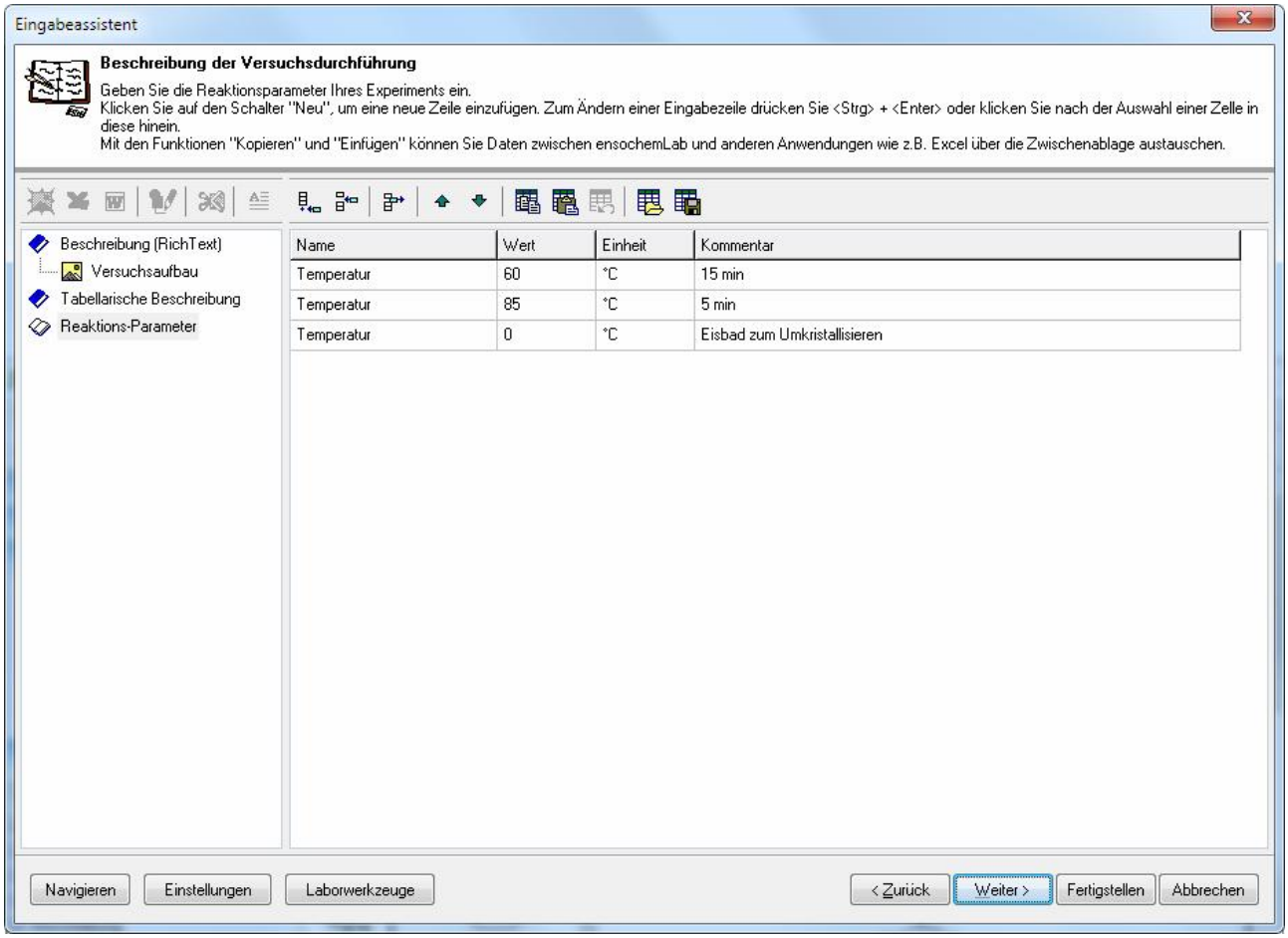
Um Datum / Zeit Angaben, die z.B. aus einer als Kopie verwendeten Vorlage stammen, an die aktuellen Werte anzupassen können Sie einen Hilfsassistenten nutzen. Mit diesem wird anhand eines neu festgelegten Referenzdatums, bzw. einer angegebenen Zeit der Verlauf neu berechnet.

3.5.3. Reaktionsparameter

Die Sektion „Reaktionsparameter“ kann zur tabellarischen Auflistung der Reaktionsbedingungen genutzt werden. (Wurde unter Druck gearbeitet? Raumtemperatur?)

Das Feld „Name“ ist ein Auswahlfeld. Jeder Parametername, den Sie angeben, wird temporär für dieses Experiment in die Liste aufgenommen und kann in allen folgenden Zeilen ausgewählt werden. Beim Anlegen eines weiteren Experiments wird diese Liste jedoch nicht übernommen. Das Feld „Einheit“ funktioniert ähnlich, hier werden aber zusätzlich noch die vom Administrator vordefinierten Maßeinheiten angeboten.

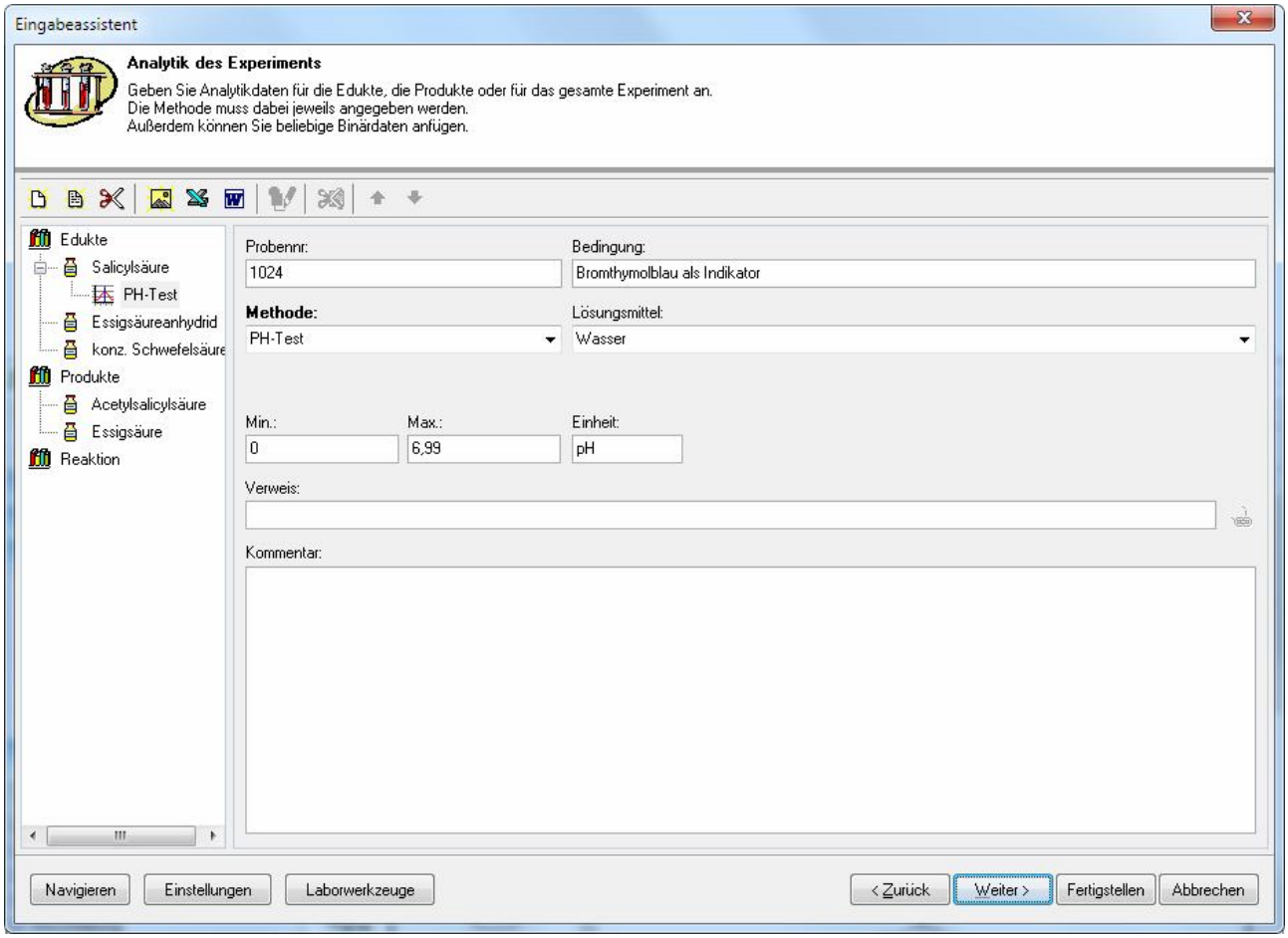
Jeder Reaktionsparameter muss mindestens einen Namen haben. Sollten Sie einen Reaktionsparameter ohne Daten eingeben, erhalten Sie beim Speichern des Experiments eine entsprechende Fehlermeldung.



Die Bearbeitung der Zellen erfolgt analog zur tabellarischen Beschreibung. Auch hier sind beliebig viele Datensätze ohne angehängte Binärdateien möglich.

3.6. Analytik

Klicken Sie auf „Weiter“, um zur Analytikseite zu gelangen.



Auf dieser Seite werden durchgeführte Analytikmethoden und deren Ergebnisse für Ihr Experiment angegeben.

Klicken Sie in der Liste auf der linken Seite auf ein Edukt, ein Produkt oder die gesamte Reaktion. Wählen Sie dann den „Neu“ Knopf, um einen weiteren Analytikdatensatz zu erstellen oder markieren Sie einen bestehenden Unterknoten, um einen bereits existierenden Analytikdatensatz zu bearbeiten. Die Daten werden auf der rechten Seite des Fensters angezeigt und können auch dort bearbeitet werden.

Mit dem „Löschen“ Knopf können Sie einen Analytikdatensatz löschen. Um einen bestehenden Datensatz zu duplizieren, klicken Sie bitte auf „Kopieren“.

Diese Funktionen sind nur für Analytikdatensätze selbst verfügbar, nicht für Kategorien oder Unterelemente.

Für jeden Datensatz ist die Angabe einer Methode zwingend erforderlich. Sie können diese entweder aus einer vom Administrator definierten Liste auswählen oder selbst eingeben. Wenn Sie einen Wert selbst eingeben, steht er in den Auswahllisten aller Analytikdatensätze dieses Experiments zur Verfügung, nicht jedoch in denen neuer Experimente. Gleiches gilt für die Liste der Lösungsmittel.

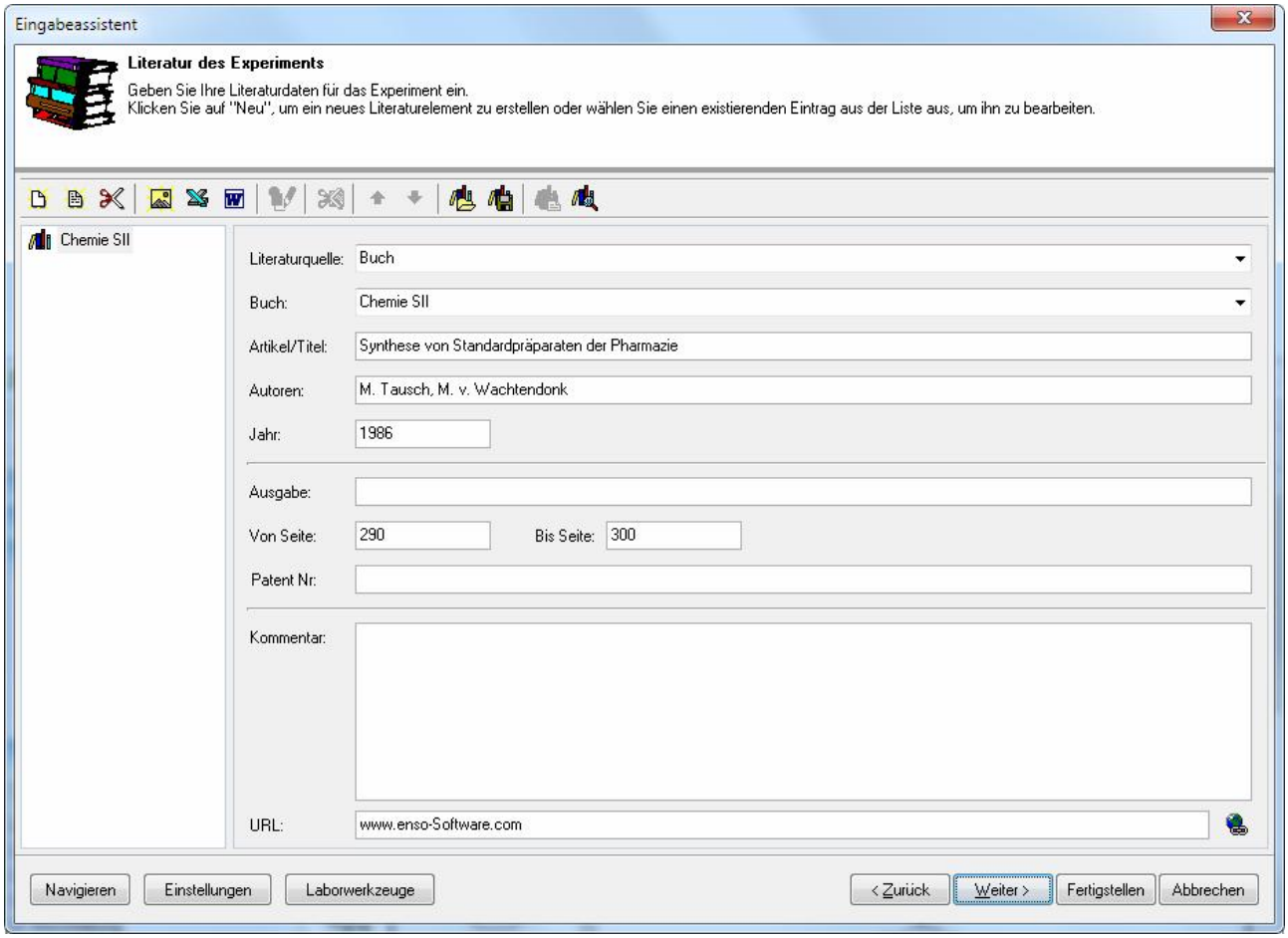
Das Analytikergebnis kann entweder numerisch oder als Text eingegeben werden. Die Art der Eingabe können Sie über die Auswahlbox „Ergebnis als Text“ festlegen. Dementsprechend verändern sich die Felder zur Dateneingabe. Der Kommentar ist unabhängig vom gewählten Format.

Jeder dieser Datensätze kann ein oder mehrere Anhänge (Binärdatensätze) enthalten. Um einen Binärdatensatz anzulegen, klicken Sie bitte auf „Neue Binärdaten“. An dieser Stelle müssen Sie im Gegensatz zur Durchführungsbeschreibung keine weiteren Daten mehr angeben, sondern nur die zu importierende Datei auswählen. Dies geschieht analog zu den Anhängen der Durchführungsbeschreibung.

Klicken Sie auf den Knopf „Binärdaten löschen“, um einen bestehenden Binärdatensatz zu löschen.

3.7. Literatur

Auf dieser Seite können Sie die von Ihnen verwendete Literatur angeben.



Klicken Sie auf „Neue Literatur“, um eine neue Literaturstelle anzulegen. Geben Sie danach auf der rechten Seite Ihre Daten ein.

Eine eingegebene URL können Sie bequem mit dem Knopf „URL testen“ in Ihrem Webbrowser aufrufen.

In der Navigationsleiste auf der linken Seite können Sie die erstellten Literaturstellen auswählen. Ein bestehender Eintrag kann nach dem Auswählen mit der Funktion „Literatur löschen“ wieder entfernt werden. Mit der Funktion „Literatur kopieren“ können Sie eine Kopie eines bestehenden Datensatzes anlegen, wenn Sie zum Beispiel nur die Ausgabe oder die relevanten Seiten eines Experiments ändern müssen.

Mit den grünen Pfeilen können Sie die Reihenfolge der Literaturdatensätze verändern.

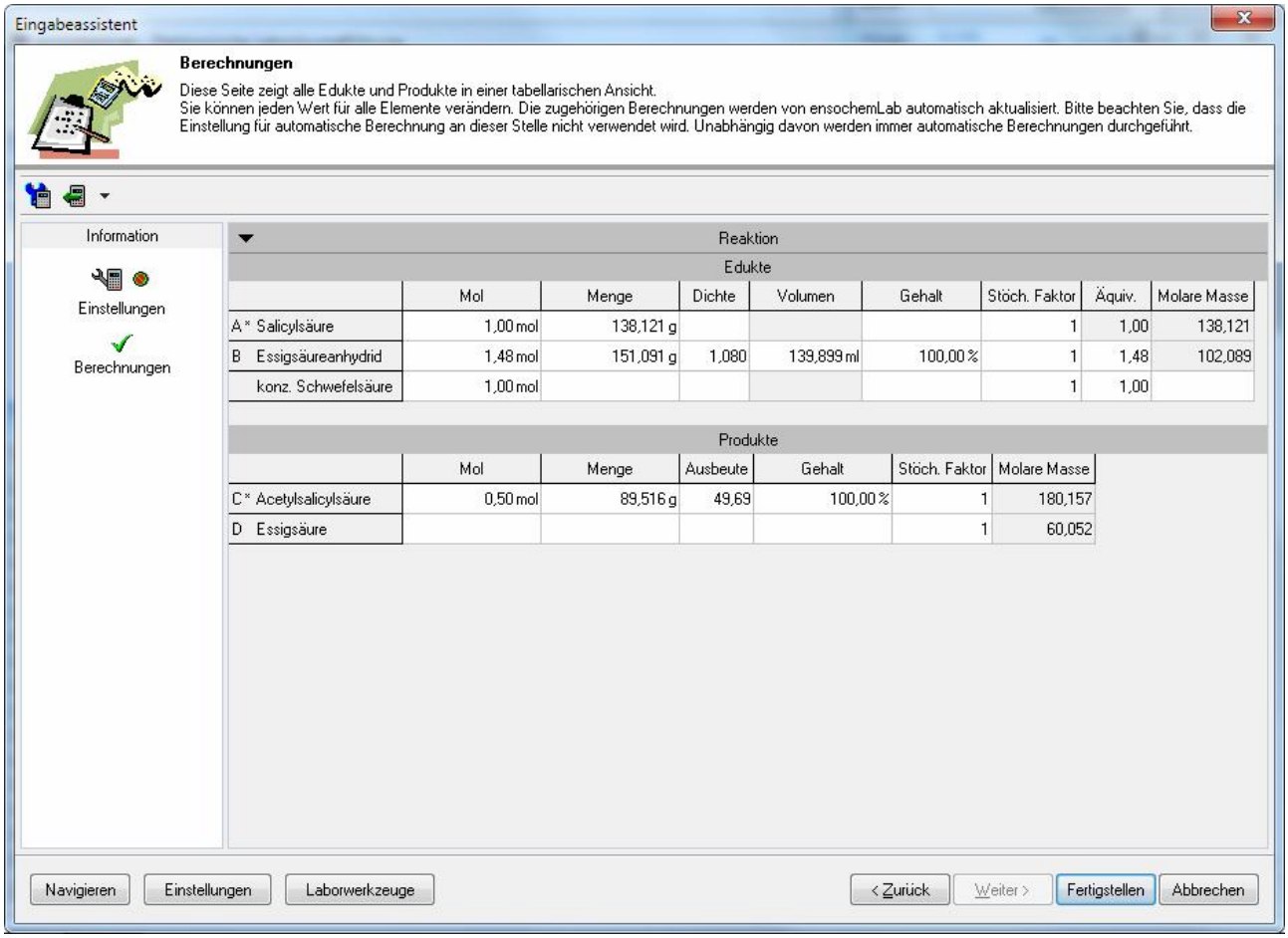
Sie können außerdem Literaturhinweise aus einer Datei oder anderen Experimenten importieren. ensochemLab bietet Ihnen zusätzlich die Möglichkeit, mit Hilfe eines internen Zwischenspeichers, Daten einzufügen die vorher in selbige kopiert wurden. Weiterhin ist es möglich Daten in eine Datei exportieren Alle Dateien werden im RIS Format erwartet und geschrieben.

Jeder dieser Datensätze kann ein oder mehrere Anhänge (Binärdatensätze) enthalten. Um einen Binärdatensatz anzulegen, klicken Sie bitte auf „Neue Binärdaten“. Dies geschieht analog zu den Anhängen der Durchführungsbeschreibung.

Klicken Sie auf den Knopf „Binärdaten löschen“, um einen bestehenden Binärdatensatz zu löschen.

3.8. Berechnungsseite

Mit dem „Weiter“ Knopf des Assistenten gelangen Sie zur Berechnungsseite:


Eingabeassistent
Berechnungen
Diese Seite zeigt alle Edukte und Produkte in einer tabellarischen Ansicht.
Sie können jeden Wert für alle Elemente verändern. Die zugehörigen Berechnungen werden von ensochemLab automatisch aktualisiert. Bitte beachten Sie, dass die Einstellung für automatische Berechnung an dieser Stelle nicht verwendet wird. Unabhängig davon werden immer automatische Berechnungen durchgeführt.
Information
Einstellungen
Berechnungen
Reaktion
Edukte
Mol Menge Dichte Volumen Gehalt Stöch. Faktor Äquiv. Molare Masse
A * Salicylsäure 1,00 mol 138,121 g 1 1,00 138,121
B Essigsäureanhydrid 1,48 mol 151,091 g 1,080 139,899 ml 100,00 % 1 1,48 102,089
konz. Schwefelsäure 1,00 mol 1 1,00
Produkte
Mol Menge Ausbeute Gehalt Stöch. Faktor Molare Masse
C * Acetylsalicylsäure 0,50 mol 89,516 g 49,69 100,00 % 1 180,157
D Essigsäure 1 60,052
Navigieren
Einstellungen
Laborwerkzeuge
< Zurück
Weiter >
Fertigstellen
Abbrechen

Auf dieser Seite sehen Sie alle berechenbaren Daten der Edukt- und Produktseite noch einmal in je einer Übersichtstabelle zusammengefasst. Zusätzlich zu den Feldern, die Ihnen auch auf der Eduktseite zur Verfügung stehen, bietet Ihnen die Berechnungsseite das Feld Volumen. Dieses Feld steht Ihnen zur Verfügung, wenn die Dichte eingetragen wurde und die Menge als Masse angegeben wird. Sie können dann Volumen oder Masse parallel angeben.

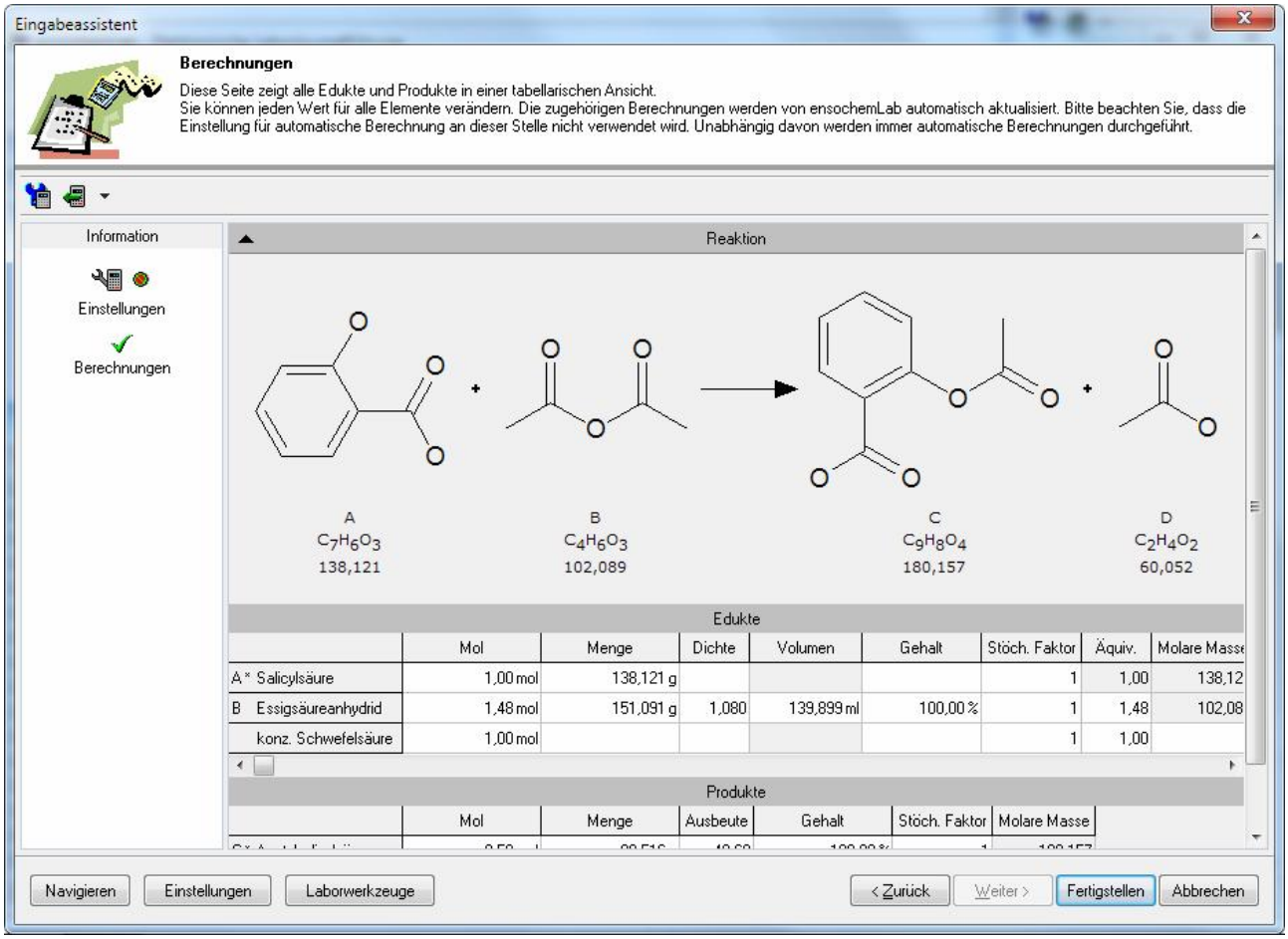
Klicken Sie in eine der Zellen, um die entsprechenden Daten zu verändern. Als Beispiel verdoppeln wir einfach die Größe unseres Ansatzes. Klicken Sie dazu in das Feld „Mol“ in der Zeile für die Salicylsäure und geben Sie 1,00 ein:

Sobald Sie das Bearbeitungsfeld verlassen, gleicht ensochemLab automatisch alle anderen betroffenen Werte an. Dass heißt, dass nun auch 1,48 mol Essigsäureanhydrid verwendet werden, da es mit einem Äquivalent von 1,48 angegeben wurde. Auch die Stoffmengen wurden jeweils verdoppelt.

Bei den Produkten sank die Ausbeute von 99,39% auf 49,69%, also die Hälfte. Die resultierende Menge wurde als Konstante beibehalten.

Unabhängig davon, ob die automatische Neuberechnung der Edukte und Produkte in Ihren persönlichen Einstellungen aktiviert ist, wird auf dieser Seite immer automatisch berechnet. Der Rechenablauf (welcher Wert wird aus welcher Angabe berechnet?) entspricht jedoch Ihren Einstellungen. Mit dem Thema „Berechnungen“ befasst sich ein gesondertes Kapitel in diesem Handbuch ausführlicher.

Mit dem Pfeil in der Reaktionszeile ganz oben können Sie die Reaktion einblenden. Sie wird aus Platzgründen standardmäßig nicht angezeigt. Durch einen erneuten Klick auf den Knopf lässt sich die Reaktion wieder ausblenden.

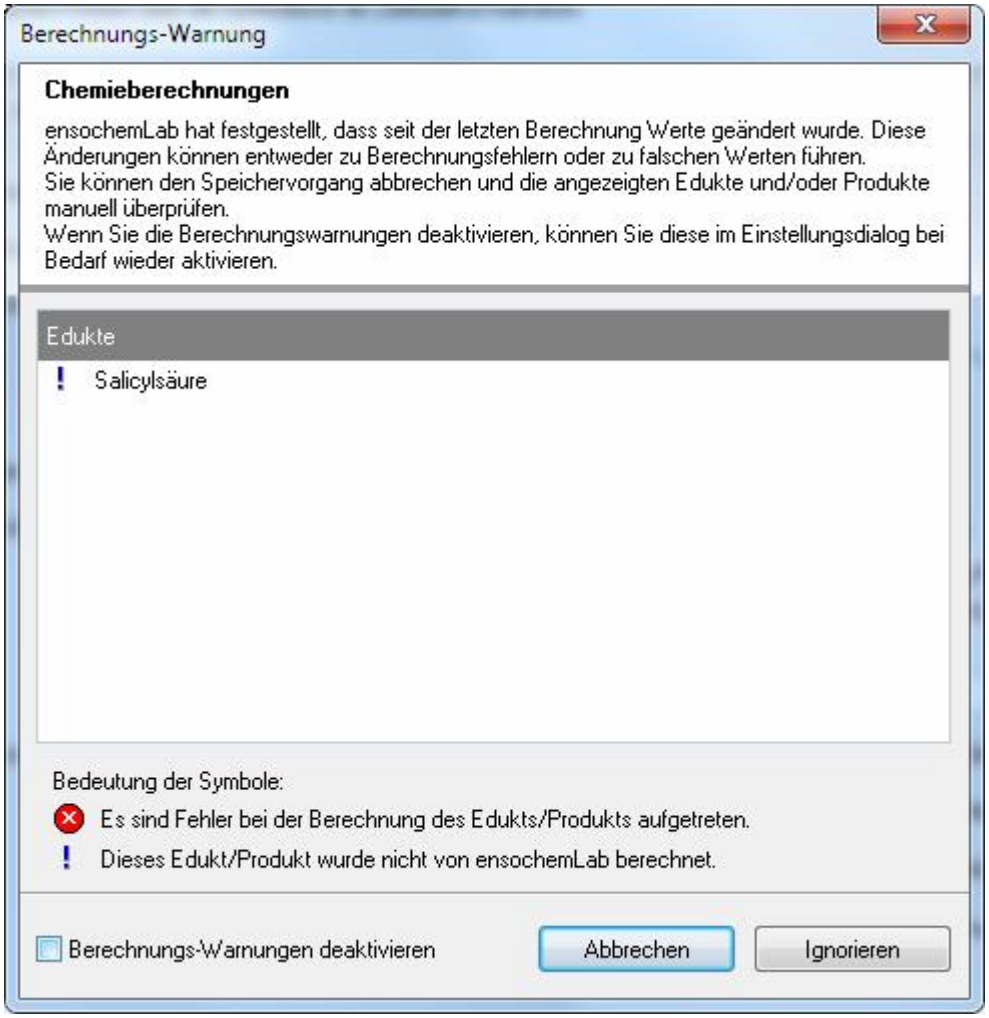


Zum Verlassen des Assistenten klicken Sie bitte auf „Fertigstellen“.

3.9. Experimente speichern

Bevor ein Experiment tatsächlich gespeichert wird, führt ensochemLab noch eine Reihe von Überprüfungen aus. So werden Sie zum Beispiel auf noch fehlende benötigte Daten hingewiesen.

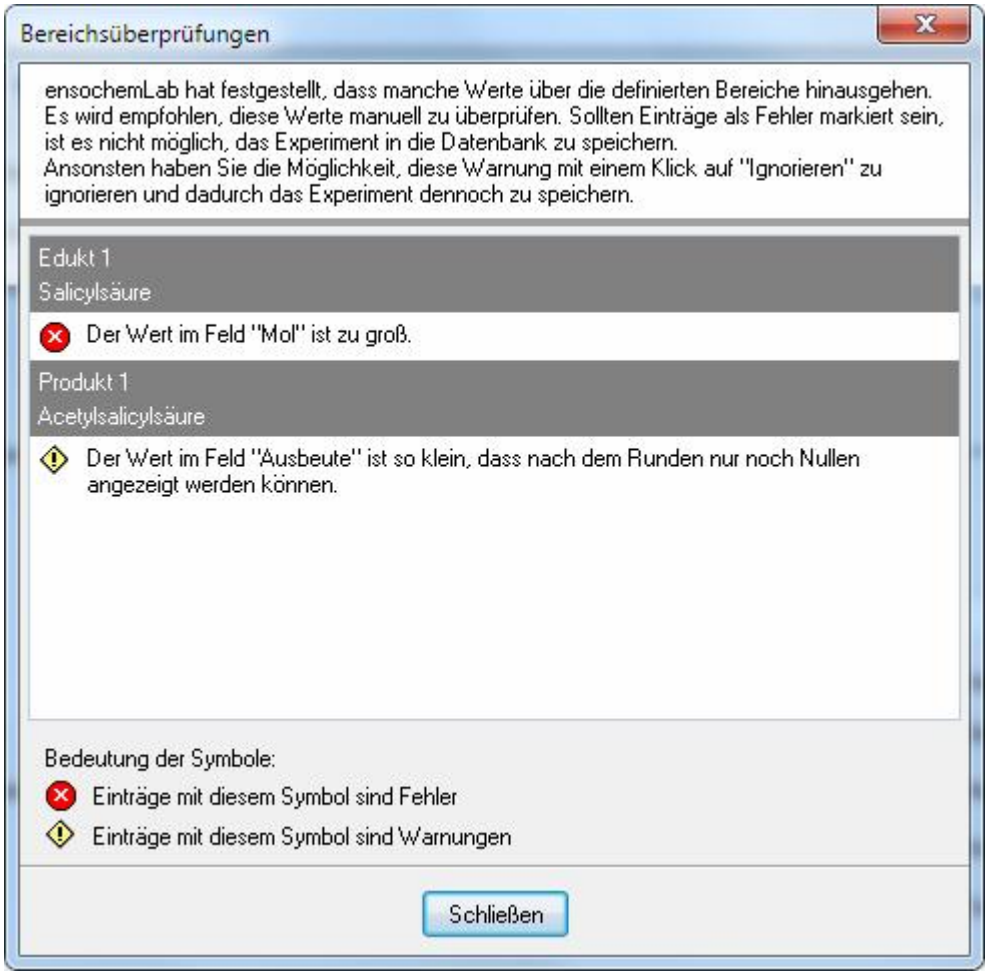
Außerdem werden die Werte Ihrer Edukte und Produkte nachgerechnet, um Inkonsistenzen festzustellen. Dabei wird auch erkannt, ob für eine Berechnung nötige Angaben fehlen. Dies geschieht unabhängig davon, ob die automatischen Berechnungen aktiviert wurden oder nicht. Etwaige Fehler werden nicht automatisch korrigiert, sondern Ihnen über einen speziellen Dialog mitgeteilt:


Berechnungs-Warnung
Chemieberechnungen
ensochemLab hat festgestellt, dass seit der letzten Berechnung Werte geändert wurde. Diese Änderungen können entweder zu Berechnungsfehlern oder zu falschen Werten führen.
Sie können den Speichervorgang abbrechen und die angezeigten Edukte und/oder Produkte manuell überprüfen.
Wenn Sie die Berechnungswarnungen deaktivieren, können Sie diese im Einstellungsdialog bei Bedarf wieder aktivieren.
Edukte
Salicylsäure
Bedeutung der Symbole:
Es sind Fehler bei der Berechnung des Edukts/Produkts aufgetreten.
Dieses Edukt/Produkt wurde nicht von ensochemLab berechnet.
Berechnungs-Warnungen deaktivieren
Abbrechen
Ignorieren

Sie können nun die entsprechenden Fehler- oder Informationsmeldungen anzeigen, indem Sie Ihre Maus über das zugehörige Symbol in der Liste bewegen. Zu jedem Edukt oder Produkt kann es beliebig viele Hinweise geben.

Mit einem Klick auf „Abbrechen“ kehren Sie zum Eingabeassistenten zurück, wo Sie Ihre Werte korrigieren oder eine manuelle Neuberechnung starten können. Um die Meldungen zu ignorieren und mit dem Speichervorgang fortzufahren, klicken Sie bitte auf „Ignorieren“. Mit dem Auswahlfeld „Berechnungs-Warnungen deaktivieren“ können Sie festlegen, dass Meldungen dieser Art zukünftig nicht mehr angezeigt werden sollen. Bitte beachten Sie, dass dies eine globale Einstellung ist, die für alle aktuellen und neuen Experimente gilt. Eine spätere Änderung ist jedoch über den Einstellungsdialog (siehe Kapitel „Anpassen Ihrer Einstellungen“) jederzeit möglich.

Eine zweite wichtige Überprüfung besteht darin, die Zahlenwerte auf ihre Größenordnung zu prüfen. Da es sich hierbei nicht um eine Berechnung handelt, findet auch die Berechnungseinstellung „Bereiche der Berechnungsergebnisse überprüfen“ keine Anwendung. Sollten Fehler oder Warnungen auftreten, erscheint der folgende Dialog:


Bereichsüberprüfungen
ensochemLab hat festgestellt, dass manche Werte über die definierten Bereiche hinausgehen.
Es wird empfohlen, diese Werte manuell zu überprüfen. Sollten Einträge als Fehler markiert sein, ist es nicht möglich, das Experiment in die Datenbank zu speichern.
Ansonsten haben Sie die Möglichkeit, diese Warnung mit einem Klick auf "Ignorieren" zu ignorieren und dadurch das Experiment dennoch zu speichern.
Edukt 1
Salicylsäure
Der Wert im Feld "Mol" ist zu groß.
Produkt 1
Acetylsalicylsäure
Der Wert im Feld "Ausbeute" ist so klein, dass nach dem Runden nur noch Nullen angezeigt werden können.
Bedeutung der Symbole:
Einträge mit diesem Symbol sind Fehler
Einträge mit diesem Symbol sind Warnungen
Schließen

Nach den jeweiligen Edukten und Produkten gruppiert sehen Sie hier eine Liste der aufgetretenen Fehler und Warnungen.

Bitte beachten Sie, dass ein Wert im Falle eines Fehlers grundsätzlich nicht gespeichert werden kann. Daher können, im Gegensatz zum weiter oben beschriebenen Berechnungsdialog, auch nur Warnungen und keine Fehler ignoriert werden. Im gezeigten Dialog (siehe Bild) existiert deshalb auch nur ein „Schließen“ Knopf, mit dem Sie zum Experimentassistenten zurückkehren können, um Ihre Werte zu verändern.

Sind Werte zu groß, so muss die Anzahl der Stellen vor dem Komma reduziert werden. Dies geschieht am einfachsten durch die Auswahl einer größeren Einheit. Sollten keine ausreichend großen Einheiten zur Verfügung stehen, wenden Sie sich bitte an Ihren Administrator.

Die folgenden Kriterien werden derzeit geprüft:

Typ	Datenfeld	Fehlerkriterium
Warnung	Gehalt	Wert größer als 100
Warnung	Ausbeute	Wert größer als 100
Fehler	Molprozente	Mehr als 6 Stellen vor dem Komma
Fehler	Äquivalente	Mehr als 4 Stellen vor dem Komma
Fehler	Dichte	Mehr als 2 Stellen vor dem Komma
Fehler	Gehalt	Mehr als 3 Stellen vor dem Komma
Fehler	Ausbeute	Mehr als 3 Stellen vor dem Komma
Fehler	alle Datenfelder	Gesamtwert besitzt mit Vor- und Nachkommastellen eine Länge von mehr als 18 Zeichen

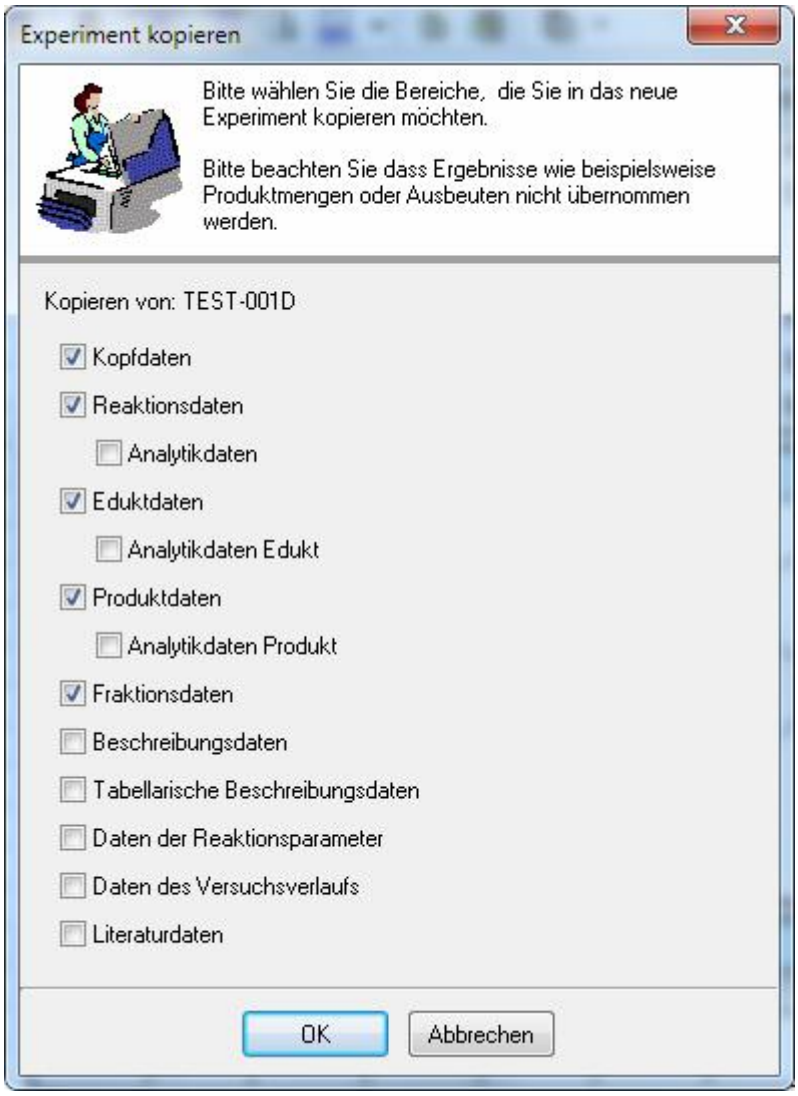
Zusammenfassung:	Mit dem Eingabeassistenten können Sie neue Experimente anlegen. Er führt Sie Schritt für Schritt durch den Vorgang. An seiner oberen Seite werden jeweils kurze Hilfetexte angezeigt, die die jeweiligen Schritte beschreiben.

3.10. Experimente kopieren

Bevor wir uns dem nächsten „großen“ Kapitel zuwenden, sollten wir noch eine weitere Funktion im Zusammenhang mit der Erstellung neuer Experimente besprechen. Wenn Sie ein bestehendes Experiment als Vorlage verwenden und in Ihrem neuen Datensatz zum Beispiel lediglich die eingesetzten Mengen verändern möchten, können Sie eine Kopie erstellen, ohne von Hand alle Daten neu eingeben zu müssen. Außerdem können Sie auf diese Art Abwandlungen von Experimenten anderer Benutzer erstellen. Sie können jedes Experiment kopieren, das Sie auch anzeigen können.

Die entsprechende Funktion finden Sie im Hauptmenü unter „Experiment | Experiment kopieren“:

Es erscheint ein Fenster in dem Sie die zu kopierenden Elemente auswählen können:



Markieren Sie bitte den entsprechenden Eintrag für jeden zu kopierenden Datenblock und klicken Sie dann auf „OK“. Nun wird der Eingabeassistent mit einer Kopie des Ursprungsexperiments geöffnet, wo Sie im Idealfall nur noch eine neue Experimentnummer eingeben müssen. Alle Datenblöcke, die Sie nicht kopiert haben, bleiben hierbei leer.

Bitte beachten Sie, dass Ergebnisdaten wie zum Beispiel die Ausbeute eines Produkts nicht kopiert werden, da diese als zu variabel angesehen werden und eine Neueingabe daher bei einer Wiederholung des Versuchs ohnehin unumgänglich ist.

Die Arbeit mit den Experimentassistenten entspricht exakt den Vorgängen beim Erstellen eines neuen Experiments wie sie weiter oben in diesem Kapitel beschrieben wurden.

Zusammenfassung:	Mit der Funktion „Experiment kopieren“ können Sie eine (veränderte) Kopie eines bestehenden Experiments erzeugen, ohne alle Daten von Hand neu eingeben zu müssen.

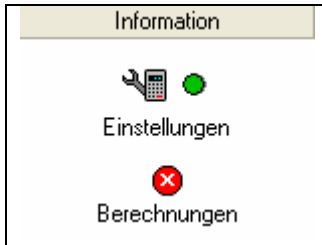
4. Automatische Berechnungen

Sie haben soeben Ihr erstes Experiment erstellt und dabei einige einfache, manuelle Berechnungen verwendet. Dieses Kapitel soll nun näher auf die Möglichkeiten zur automatischen Berechnung von Werten sowie die zugehörigen Konfigurationsmöglichkeiten eingehen.

Da diese Einstellmöglichkeiten die Funktion jedoch recht komplex werden lassen, haben wir an das Ende dieses Kapitels eine Reihe von Praxisbeispielen angehängt, die Ihnen das Verständnis erleichtern sollen. Außerdem empfehlen wir Ihnen, sich unbedingt vor dem Praxiseinsatz der Funktionen einen eigenen Einblick durch Ausprobieren der gezeigten Möglichkeiten zu verschaffen. Dies ist zum Beispiel an unserem soeben angelegten Beispielexperiment möglich.

4.1. Allgemeine Einstellungen

Die Berechnungen können sehr weit reichend an die Bedürfnisse des Anwenders angepasst werden. Sie haben diese Einstellungen jederzeit im Blick. Auf jeder Seite, auf der Berechnungen durchgeführt werden können, gibt es folgende Hinweisbox:



Einstellungen:

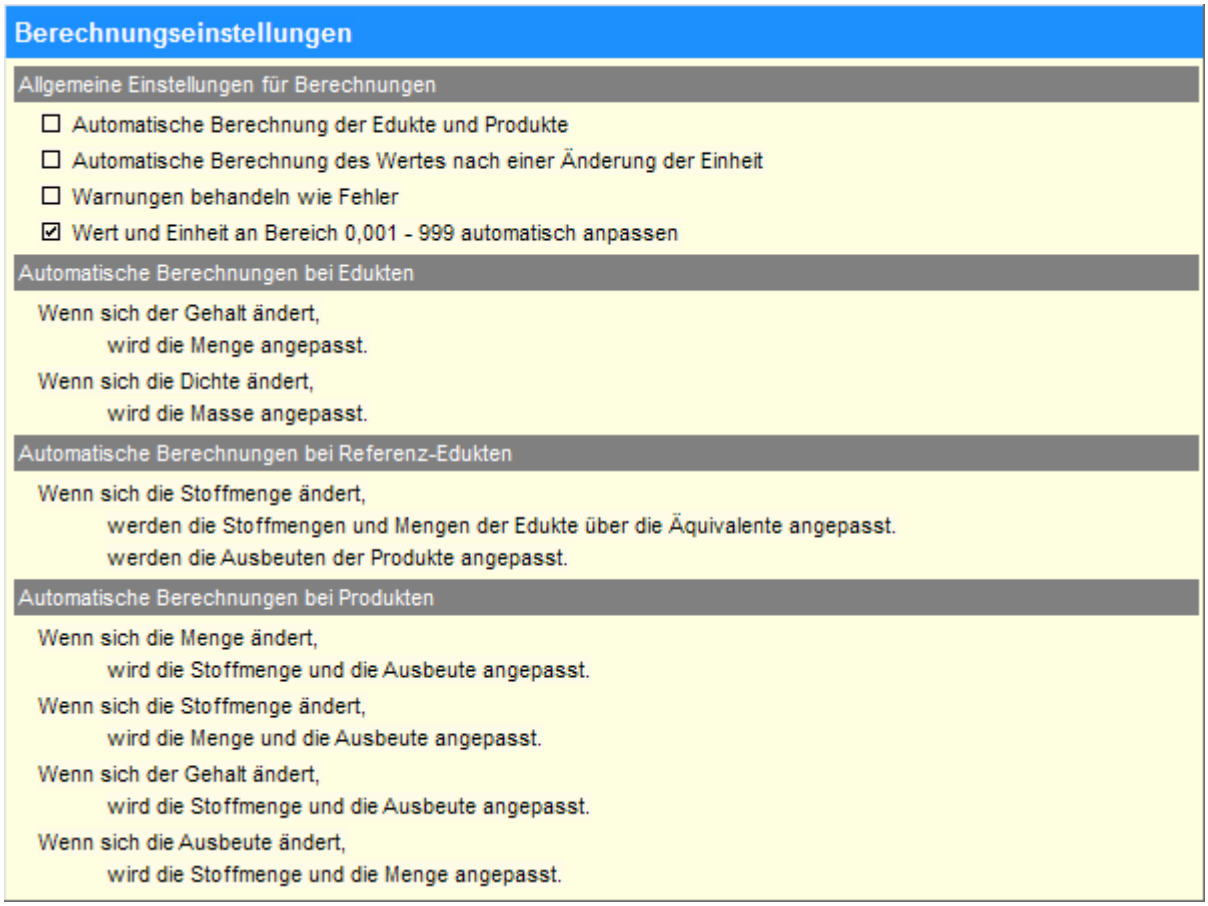
- Die automatische Berechnung ist aktiviert.
- Die automatischen Berechnungen sind normalerweise deaktiviert, wurden aber temporär eingeschaltet.
- Die automatische Berechnung ist deaktiviert.
- Die automatischen Berechnungen sind normalerweise eingeschaltet, wurden aber temporär deaktiviert.

Berechnung:

- Bei der Berechnung sind Fehler aufgetreten.
- Die Berechnung konnte ohne Fehler durchgeführt werden.
- Zu dieser Berechnung gibt es Hinweise.
- Die Rechenwerte passen nicht zusammen und sollten erneut berechnet werden.

Um weitere Hinweise zur Berechnung zu erhalten, bewegen Sie die Maus über das jeweils angezeigte Symbol.

Wenn Sie die Maus auf das Symbol mit dem Taschenrechner bewegen, werden die aktuellen Berechnungseinstellungen im folgenden Hinweisfenster angezeigt:


Berechnungseinstellungen
Allgemeine Einstellungen für Berechnungen
☐ Automatische Berechnung der Edukte und Produkte
☐ Automatische Berechnung des Wertes nach einer Änderung der Einheit
☐ Warnungen behandeln wie Fehler
☑ Wert und Einheit an Bereich 0,001 - 999 automatisch anpassen
Automatische Berechnungen bei Edukten
Wenn sich der Gehalt ändert,
wird die Menge angepasst.
Wenn sich die Dichte ändert,
wird die Masse angepasst.
Automatische Berechnungen bei Referenz-Edukten
Wenn sich die Stoffmenge ändert,
werden die Stoffmengen und Mengen der Edukte über die Äquivalente angepasst.
werden die Ausbeuten der Produkte angepasst.
Automatische Berechnungen bei Produkten
Wenn sich die Menge ändert,
wird die Stoffmenge und die Ausbeute angepasst.
Wenn sich die Stoffmenge ändert,
wird die Menge und die Ausbeute angepasst.
Wenn sich der Gehalt ändert,
wird die Stoffmenge und die Ausbeute angepasst.
Wenn sich die Ausbeute ändert,
wird die Stoffmenge und die Menge angepasst.

Das Fehlersymbol signalisiert einen oder mehrere Fehler bei den durchgeführten Berechnungen. Wenn Sie die Maus auf das Symbol bewegen, werden diese Fehler angezeigt. Wenn Sie z.B. die Menge als Volumen angeben und keine Dichte vorhanden ist, erhalten Sie folgende Fehlermeldung, wenn Sie das Eingabefeld für die Menge verlassen:

Auf diese Weise werden dort auch Warnungen und Hinweise angezeigt.

Neben dem Aktivieren der automatischen Berechnungen können Sie auch festlegen, dass ensochemLab bei Änderungen an einer Einheit die zugehörige Rechengröße (Menge, Stoffmenge, Gehalt) auf die neue Einheit umrechnen soll. D.h. 100 [ml] werden zu 0,1 [l], wenn die Einheit auf [l] umgestellt wird.

Bitte beachten Sie, dass auf der Berechnungsseite im Eingabeassistenten die automatische Berechnung immer aktiv ist.

Daneben bietet ensochemLab auch die Möglichkeit, Werte automatisch an einen Bereich zwischen 0.001 und 999 anzupassen. Fällt ein Wert aus diesem Bereich heraus, wird er automatisch in die nächste passende größere Einheit umgerechnet. Entstehen bei der nächsten Berechnung also zum Beispiel 1200 [ml], werden diese somit in 1,2 [l] umgewandelt. Bitte beachten Sie, dass nur Ergebnisse von Berechnungen von dieser Einstellung betroffen sind.

Die Option „Warnungen als Fehler behandeln“ steuert das Verhalten beim Schließen des Assistenten. Wenn Berechnungsfehler auftreten, werden diese angezeigt, bevor das Experiment gespeichert wird. Warnungen werden standardmäßig nicht angezeigt. Wenn diese Option ausgewählt ist, wird auch bei Warnungen ein Dialog angezeigt.

4.2. Einstellungen für automatische Berechnungen

Die automatischen Berechnungen können im Hauptmenü über den Menupunkt „Optionen | Einstellungen“ auf der Seite „Berechnung“ eingestellt werden. Im Eingabeassistent können Sie diese Einstellungen direkt über den Knopf „Berechnungseinstellungen“ erreichen. Beim Bearbeiten eines Experiments in der Anzeige sind sie außerdem über die rechte Maustaste zugänglich.

Wenn die automatische Berechnung eingeschaltet ist, erfolgt beim Verlassen eines Eingabefelds eine Neuberechnung aller abhängigen Größen.

Wie eine Neuberechnung erfolgen soll, hängt sehr stark von der jeweiligen Situation (Planung einer Synthese, Korrektur eines Wertes, Neueingabe eines Wertes etc.) ab. Aus diesem Grund gibt es für alle denkbaren Szenarien spezielle Einstellmöglichkeiten:

Automatische Berechnungen bei den Edukten

- Wenn sich der Gehalt ändert,
  - wird die Menge angepasst.
  - wird die Stoffmenge angepasst.
- Wenn sich die Dichte ändert,
  - wird das Volumen angepasst.
  - wird die Masse angepasst.

Automatische Berechnungen bei Referenz-Edukten

- Wenn sich die Stoffmenge ändert,
  - werden die Stoffmengen und Mengen der Edukte über die Äquivalente angepasst.
  - werden die Stoffmengen und Mengen aller Edukte über den Faktor („Alte Stoffmenge“/“Neue Stoffmenge“) angepasst.
- Wenn sich die Stoffmenge ändert,
  - werden die Stoffmengen und Mengen der Produkte angepasst.
  - werden die Ausbeuten der Produkte angepasst.
  - werden die Stoffmengen und Mengen aller Produkte über den Faktor („Alte Stoffmenge“/“Neue Stoffmenge“) angepasst.

Automatische Berechnungen bei Produkten

- Wenn sich die Menge ändert,
  - wird die Stoffmenge und die Ausbeute angepasst.
  - wird die Stoffmenge des Produkts und des Referenzedukts angepasst.
- Wenn sich die Stoffmenge ändert,
  - wird die Menge und die Ausbeute angepasst.
  - wird Stoffmenge des Referenzedukts angepasst.
- Wenn sich der Gehalt ändert,
  - wird die Stoffmenge und die Ausbeute angepasst.
  - wird die Menge angepasst.
  - wird die Stoffmenge des Produkts und des Referenzedukts angepasst.
- Wenn sich die Ausbeute ändert,
  - wird die Stoffmenge und die Menge angepasst.
  - wird Stoffmenge des Referenzedukts angepasst.

Die automatische Neuberechnung von abhängigen Rechengrößen kann für die Edukt- und Produktseite des Eingabeassistenten sowie für das „Bearbeiten von Experimenten in der Anzeige“ aktiviert werden. Auf der Seite “Berechnungen“ im Eingabeassistenten wird immer automatisch berechnet.

Die automatische Berechnung zielt prinzipiell immer darauf ab, Menge (Masse bzw. Volumen) in Stoffmenge umzurechnen (und umgekehrt). Da diese Umrechnung jedoch von anderen Größen (Molare Masse, Gehalt, Dichte etc.) abhängt, muss natürlich auch bei der Änderung dieser Größen eine Neuberechnung erfolgen.

Änderungen folgender Größen bewirken eine automatische Neuberechnung:

1. Menge (Masse, Volumen)
    - Wenn die Menge geändert wird, muss natürlich die Stoffmenge angepasst werden. Die Anpassung der Stoffmenge erfordert bei Edukten auch eine Anpassung der Äquivalente. Bei Produkten, die als zusätzliche Größe noch über die Ausbeute verfügen, gibt es darüber hinaus noch zwei weitere Berechnungsalternativen, die in den Einstellungen festgelegt werden können. Entweder wird die Ausbeute des Produkts oder die Stoffmenge des Referenzedukts angepasst. Eine Anpassung der Stoffmenge des Referenzedukts hat wiederum weit reichende Folgen für alle Edukte und Produkte.
2. Stoffmenge
    - Eine Änderung der Stoffmenge hat in jedem Fall Auswirkungen auf die Masse (bzw. Volumen, falls eine Dichte angegeben wurde).
    - Wenn die Stoffmenge des Referenzedukts geändert wird, hat das Auswirkungen auf alle Edukte und Produkte. Bei den Edukten werden die Stoffmengen entweder über die Äquivalente oder, falls gewünscht, über das Verhältnis „alter Stoffmenge zu neuer Stoffmenge“ angepasst. Von diesen Änderungen sind dann natürlich auch die Mengen der jeweiligen Edukte betroffen.
    - Bei den Produkten kommt zu den Rechenoptionen der Edukte noch eine weitere Option: Anstatt die Mengen und Stoffmengen anzupassen, kann auch die Ausbeute an die neue Stoffmenge des Referenzedukts angepasst werden
3. Gehalt
    - Änderungen des Gehalts können sich einerseits auf die Stoffmenge und andererseits auf die Menge auswirken. In welche Richtung gerechnet wird – Stoffmenge oder Menge – kann in den Einstellungen festgelegt werden.
4. Dichte
    - Wenn sich die Dichte ändert, kann entweder die Masse oder das Volumen neu berechnet werden. Dies kann in den Einstellungen festgelegt werden.
    - Die Dichte steht nur für die Edukte zur Verfügung
    - Das Volumen kann nur auf der Seite „Berechnungen“ im Eingabeassistent oder beim „Bearbeiten von Experimenten in der Anzeige“ explizit eingegeben werden, wenn eine Dichte vorhanden ist.

5. Molare Masse
    - Die Änderung der Molaren Masse wird wie eine Änderung des Gehalts behandelt
6. Ausbeute
    - Anpassungen nach Änderungen der Ausbeute haben entweder Auswirkungen auf die Menge und Stoffmenge des jeweiligen Produkts oder auf die Stoffmenge des Referenzedukts. Dies hat natürlich seinerseits evtl. Auswirkungen auf alle Edukte und Produkte.
7. Äquivalent / Molprozent
    - Wenn Äquivalente geändert werden, werden die Stoffmenge und die Menge des Edukts angepasst.
    - Bei einer Änderung der Stoffmenge des Referenzedukts werden die Stoffmengen der Edukte über die Äquivalente angepasst. Umgekehrt werden die Äquivalente bei einer Änderung der Stoffmenge eines Edukts angepasst.
8. Beladung
    - Die Beladung [mmol/g] kann unabhängig vom Gehalt verwendet werden.
    - Die Berechnung entspricht der des Gehalts mit der Einheit [Mol/Masse].
    - Im Unterschied zur Verwendung des Gehalts mit der Einheit [Mol/Masse] gibt es bei der Beladung die Möglichkeit, eine Trägersubstanz anzugeben.
    - Die Einheit [mmol/g] ist fest vorgegeben und lässt sich nicht ändern.
    - Das Verhalten bei Änderungen der Beladung entspricht der dem Verhalten bei der Änderung des Gehalts.

4.3. Beispiele von Einstellungen der automatischen Berechnung

Die komplexen Auswirkungen verschiedener Einstellungen sind anhand der folgenden Beispiele zu sehen.

4.3.1 Allgemein

Ausgangssituation

	Mol	Menge	Dichte	Volumen	Gehalt	Äquivalent	M
Referenzedukt	0,08 mol	16,660 g	1,100	15,146 ml		1,00	208,254
Edukt 2	0,46 mol	67,000 g			98,5 %	5,81	141,940
	Mol	Menge			Gehalt	Ausbeute	M
Produkt	17,35 mmol	3,3 g				21,68	190,238

Es wird jeweils ein Wert geändert. Dieser manuell geänderte Wert wird blau dargestellt, die neu berechneten Werte rot.
Die gravierendsten Auswirkungen haben Änderungen am Referenzedukt und an den Produkten, wenn die Berechnungsoptionen entsprechend gesetzt sind.

4.3.2 Änderung der Stoffmenge des Referenzedukts

Einstellung „Stoffmengen und Mengen aller Edukte anpassen“ und „Ausbeuten der Produkte anpassen“

Es wurde geplant 16,6 g des Referenzedukts einzusetzen. Tatsächlich wurden 17 g eingewogen.

	Mol	Menge	Dichte	Volumen	Gehalt	Äquivalent	M
Referenzedukt	0,08 mol	**17,000** g	1,100	15,455 ml		1,00	208,254
Edukt 2	0,47 mol	68,366 g			98,5 %	5,81	141,940
	Mol	Menge			Gehalt	Ausbeute	M
Produkt	17,35 mmol	3,3 g				21,25	190,238

Einstellung „Stoffmengen und Mengen der Produkte anpassen“

Welche Produktmengen erhält man, wenn man statt 16,6 g des Referenzedukts 17 g einsetzt?

	Mol	Menge	Dichte	Volumen	Gehalt	Äquivalent	M
Referenzedukt	0,08 mol	**17,000** g	1,100	15,455 ml		1,00	208,254
Edukt 2	0,47 mol	68,366 g			98,5 %	5,81	141,940
	Mol	Menge			Gehalt	Ausbeute	M
Produkt	17,76 mol	3,367 g				21,68	190,238

4.3.3 Änderung der Menge des Produkts

Die Stoffmenge des Produkts wird von 3,3 g auf 4 g korrigiert.

Einstellung „Stoffmenge und Ausbeute anpassen“

Wenn die Auswage des Produkts korrigiert werden soll, ist diese Einstellung die richtige.

	Mol	Menge	Dichte	Volumen	Gehalt	Äquivalent	M
Referenzedukt	0,08 mol	16,660 g	1,000	15,146 ml		1,00	208,254
Edukt 2	0,46 mol	67,000 g			98,5 %	5,81	141,940
	Mol	Menge			Gehalt	Ausbeute	M
Produkt	21,03 mmol	**4** g				21,68	190,238

Einstellung „Stoffmenge des Produkts und des Referenzedukts anpassen“

Es wird geplant 4 g des Produkts herzustellen. Mit dieser Einstellung werden die Einsatzmengen der Edukte berechnet.

	Mol	Menge	Dichte	Volumen	Gehalt	Äquivalent	M
Referenzedukt	0,10 mol	20,194 g	1,000	18,358 ml		1,00	208,254
Edukt 2	0,58 mol	83,579 g			98,5 %	5,81	141,940
	Mol	Menge			Gehalt	Ausbeute	M
Produkt	21,03 mmol	**4** g				21,68	190,238

4.3.4 Änderung der Ausbeute

Die Ausbeute des Produkts wird von 21,68% auf 30,00% geändert.

Einstellung „Stoffmenge des Referenzedukts anpassen“

	Mol	Menge	Dichte	Volumen	Gehalt	Äquivalent	M
Referenzedukt	0,06 mol	12,042 g	1,100	10,947 ml		1,00	208,254
Edukt 2	0,34 mol	48,995 g			98,5 %	5,81	141,940
	Mol	Menge			Gehalt	Ausbeute	M
Produkt	17,35 mmol	3,3 g				**30,00**	190,238

4.3.5 Änderung des Gehalts

Der Gehalt des zweiten Edukts wird von 98,5% auf 88,5% gesenkt.

Einstellung „Menge anpassen“

	Mol	Menge	Dichte	Volumen	Gehalt	Äquivalent	M
Edukt 2	0,46 mol	74,571 g			**88,5** %	5,81	141,940

Einstellung „Stoffmenge anpassen“

	Mol	Menge	Dichte	Volumen	Gehalt	Äquivalent	M
Edukt 2	0,42 mol	67,000 g			**88,5** %	5,22	141,940

4.4. Spezielle Einheiten des Gehalts

4.4.1 Molprozent

Molprozent werden nur in den Fraktionen verwendet, um die Stoffmengenverteilung auf verschiedene Produkte zu berechnen. Die berechneten Werte können von dort aus in die Produkte übernommen werden. Mit Molprozent kann nach der Übernahme aus den Fraktionen nicht mehr gerechnet werden.

4.4.2 Volumen / Volumen

Berechnungen über Volumen/Volumen-Einheiten sind eigentlich nicht möglich, da die Dichte der Reinsubstanz nicht bekannt ist. Die Berechnung erfolgt mit einem entsprechenden Hinweis näherungsweise über die Einheit Masse/Volumen.

4.4.3 Flächenprozent

Flächenprozent werden näherungsweise als Massen bzw. Volumen-Prozentangaben (abhängig von der Einheit der Menge) betrachtet. Die Angabe von Flächenprozent hat rein informativen Charakter.

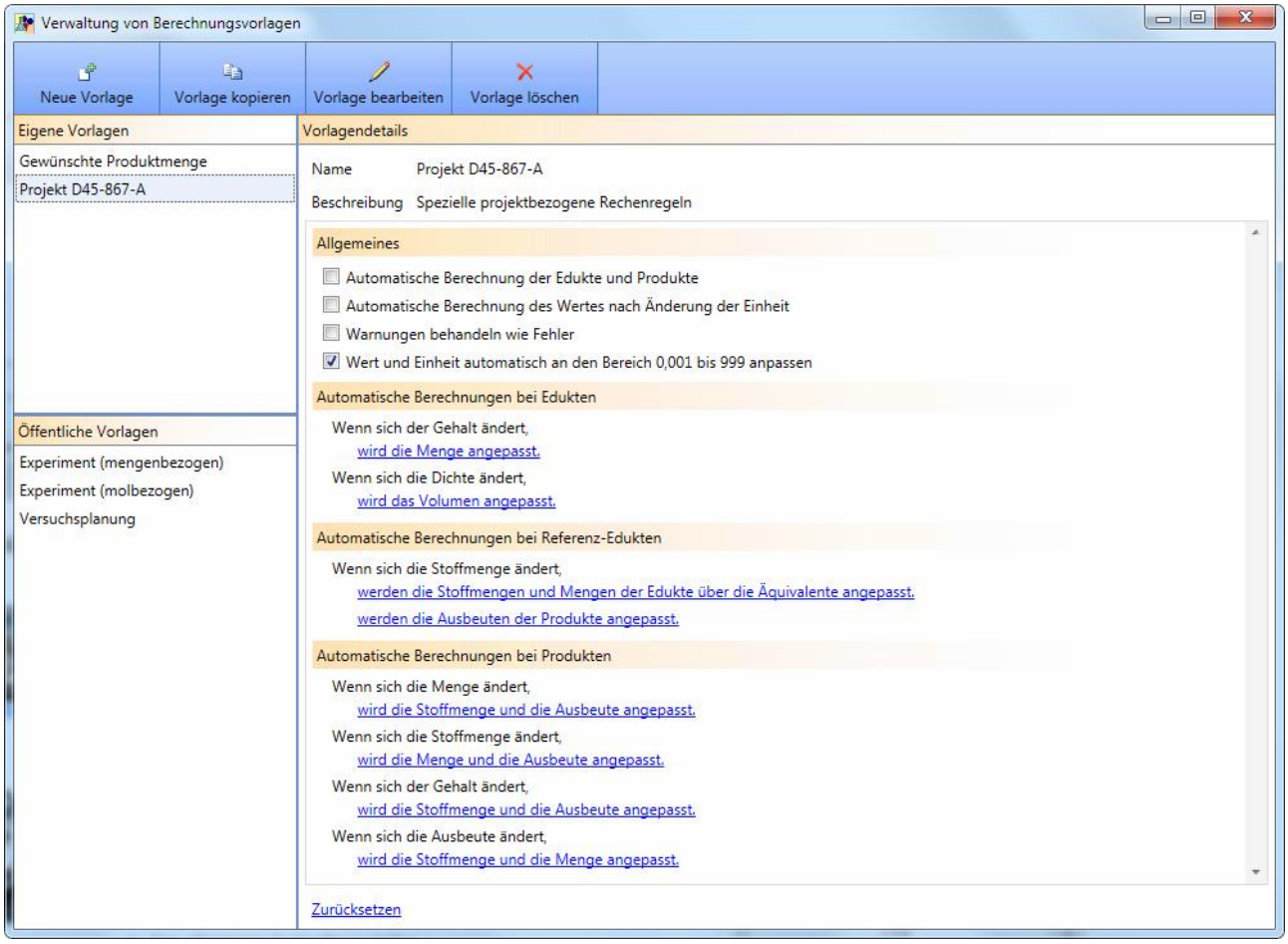
4.4.4 Fraktionen

Ab der Version 3 können neben Massenprozenten und Flächenprozent auch Molprozente verwendet werden. Auch eine Datenübernahme dieser Einheit in die Produkte ist möglich. Mit Molprozenten wird nur innerhalb der Fraktionen gerechnet.

4.5. Berechnungsvorlagen

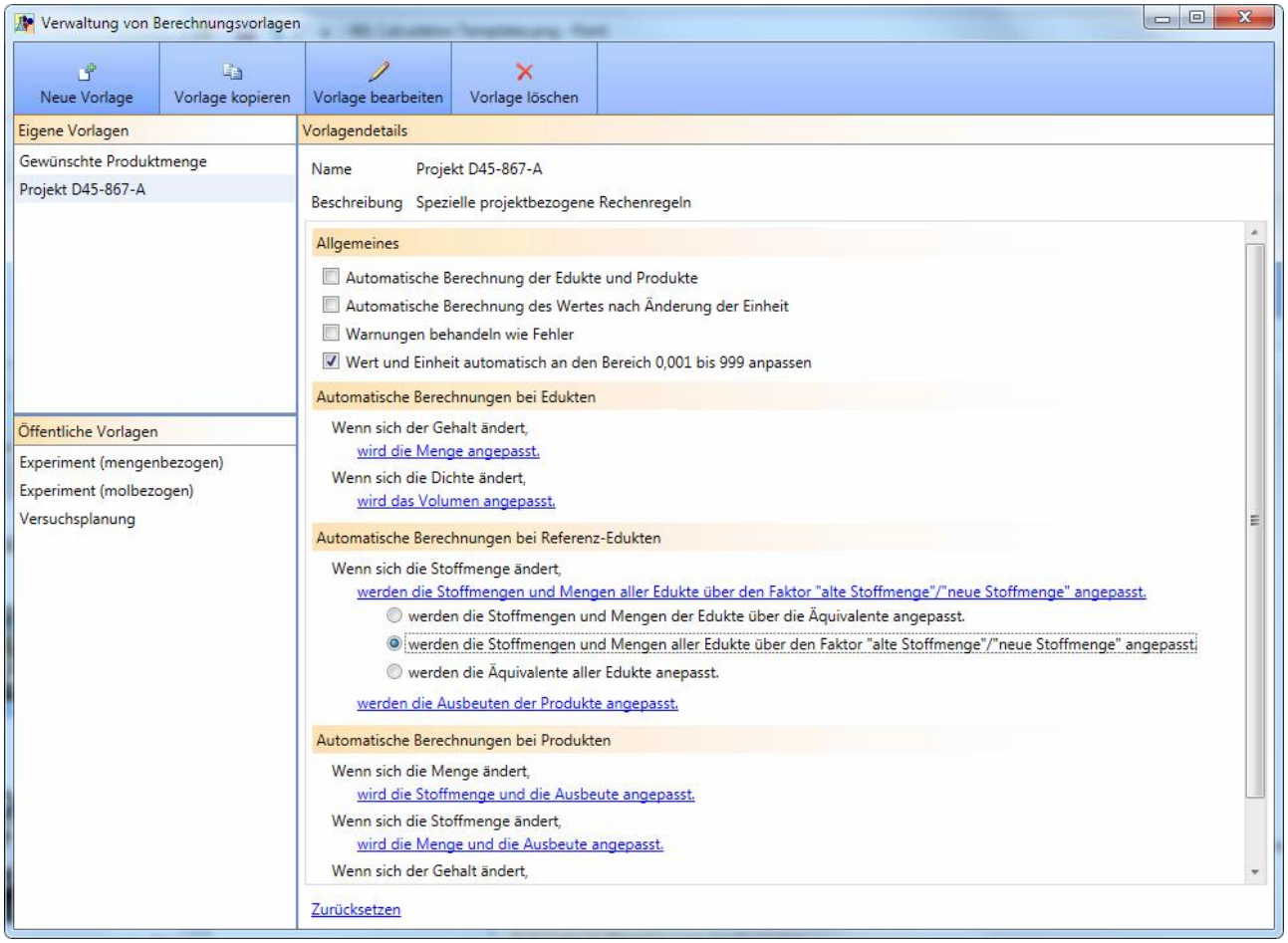
Sie können einen Satz von Berechnungseinstellungen zu einer Vorlage zusammenfassen. Dies ermöglicht Ihnen, schnell zwischen verschiedenen Berechnungsarten zu wechseln, ohne alles neu einstellen zu müssen.

Um eine Berechnungsvorlage zu erstellen, klicken Sie bitte im Hauptmenü unter „Optionen“ auf „Berechnungsvorlagen bearbeiten“. Das folgende Fenster erscheint:


Verwaltung von Berechnungsvorlagen
Neue Vorlage
Vorlage kopieren
Vorlage bearbeiten
Vorlage löschen
Eigene Vorlagen
Gewünschte Produktmenge
Projekt D45-867-A
Öffentliche Vorlagen
Experiment (mengenbezogen)
Experiment (molbezogen)
Versuchsplanung
Vorlagendetails
Name Projekt D45-867-A
Beschreibung Spezielle projektbezogene Rechenregeln
Allgemeines
Automatische Berechnung der Edukte und Produkte
Automatische Berechnung des Wertes nach Änderung der Einheit
Warnungen behandeln wie Fehler
Wert und Einheit automatisch an den Bereich 0,001 bis 999 anpassen
Automatische Berechnungen bei Edukten
Wenn sich der Gehalt ändert,
wird die Menge angepasst.
Wenn sich die Dichte ändert,
wird das Volumen angepasst.
Automatische Berechnungen bei Referenz-Edukten
Wenn sich die Stoffmenge ändert,
werden die Stoffmengen und Mengen der Edukte über die Äquivalente angepasst.
werden die Ausbeuten der Produkte angepasst.
Automatische Berechnungen bei Produkten
Wenn sich die Menge ändert,
wird die Stoffmenge und die Ausbeute angepasst.
Wenn sich die Stoffmenge ändert,
wird die Menge und die Ausbeute angepasst.
Wenn sich der Gehalt ändert,
wird die Stoffmenge und die Ausbeute angepasst.
Wenn sich die Ausbeute ändert,
wird die Stoffmenge und die Menge angepasst.
Zurücksetzen

In der oberen linken Liste sehen Sie (soweit bereits vorhanden) Ihre eigenen Berechnungsvorlagen. Links unten steht Ihnen eine Liste der vom Administrator vordefinierten Berechnungsvorlagen zur Verfügung.

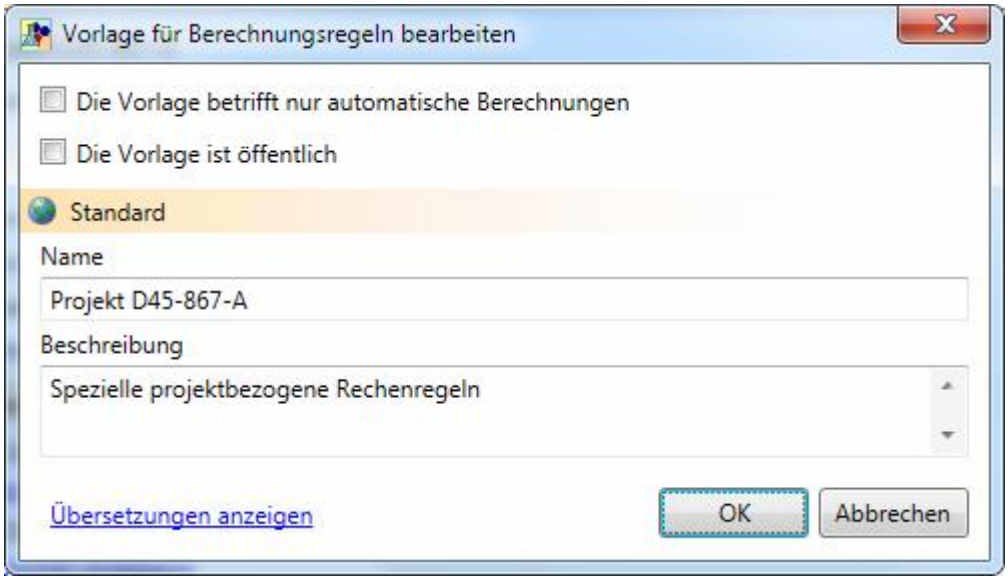
Die Konfiguration der in einer Berechnungsvorlage enthaltenen Recheneinstellungen erfolgt im Fenster auf der rechten Seite. Die ausgewählte Berechnungsvorlage können Sie direkt im Fenster bearbeiten, wie es weiter oben in diesem Kapitel bereits beschrieben ist. Ihre Einstellungen werden automatisch gespeichert.


Verwaltung von Berechnungsvorlagen
Neue Vorlage
Vorlage kopieren
Vorlage bearbeiten
Vorlage löschen
Eigene Vorlagen
Gewünschte Produktmenge
Projekt D45-867-A
Öffentliche Vorlagen
Experiment (mengenbezogen)
Experiment (molbezogen)
Versuchsplanung
Vorlagendetails
Name Projekt D45-867-A
Beschreibung Spezielle projektbezogene Rechenregeln
Allgemeines
Automatische Berechnung der Edukte und Produkte
Automatische Berechnung des Wertes nach Änderung der Einheit
Warnungen behandeln wie Fehler
Wert und Einheit automatisch an den Bereich 0,001 bis 999 anpassen
Automatische Berechnungen bei Edukten
Wenn sich der Gehalt ändert,
wird die Menge angepasst.
Wenn sich die Dichte ändert,
wird das Volumen angepasst.
Automatische Berechnungen bei Referenz-Edukten
Wenn sich die Stoffmenge ändert,
werden die Stoffmengen und Mengen aller Edukte über den Faktor "alte Stoffmenge"/"neue Stoffmenge" angepasst.
werden die Stoffmengen und Mengen der Edukte über die Äquivalente angepasst.
werden die Stoffmengen und Mengen aller Edukte über den Faktor "alte Stoffmenge"/"neue Stoffmenge" angepasst
werden die Äquivalente aller Edukte anepasst.
werden die Ausbeuten der Produkte angepasst.
Automatische Berechnungen bei Produkten
Wenn sich die Menge ändert,
wird die Stoffmenge und die Ausbeute angepasst.
Wenn sich die Stoffmenge ändert,
wird die Menge und die Ausbeute angepasst.
Wenn sich der Gehalt ändert,
Zurücksetzen

Als Anwender dürfen Sie nur Ihre eigenen Vorlagen bearbeiten und löschen. Sie können aber eine öffentliche Vorlage kopieren und Ihre private Kopie beliebig verändern.

Administratoren können zwischen einem Anwender- und einem Administratormodus umschalten. Im Administratormodus wird eine Liste von administrativen Berechnungsvorlagen angezeigt. Diese Vorlagen dürfen unabhängig vom Eigentümer von allen Administratoren bearbeitet oder gelöscht werden. Im Anwendermodus werden diese Vorlagen in der Liste der öffentlichen Vorlagen angezeigt (sofern sie als öffentlich gekennzeichnet sind).

Um eine neue Vorlage zu erstellen klicken Sie auf „Neue Vorlage“, um die ausgewählte Vorlage zu bearbeiten auf „Vorlage bearbeiten“. In beiden Fällen öffnet sich der folgende Dialog:



Sie können hier einen Namen und eine optionale Beschreibung angeben.

Mit dem Ankreuzfeld „Vorlage betrifft nur automatische Berechnungen“ können Sie festlegen, dass alle nicht die automatische Berechnung betreffenden Optionen aus dieser Vorlage ausgeblendet werden sollen.

Wenn Sie Administrator sind oder Ihr Administrator die Funktion, auch normalen Benutzern die Erstellung öffentlicher Berechnungsvorlagen zu erlauben, aktiviert hat, stehen Ihnen weitere Optionen zur Verfügung. Sie können in diesem Fall Vorlagen als öffentlich kennzeichnen damit sie auch anderen Anwendern zur Verfügung stehen. Mit einem Klick auf „Übersetzungen anzeigen“ können Sie den Dialog erweitern um deutsche, englische und französische Texte für Name und Beschreibung anzugeben.

4.6. Berechnungsfunktionen

An den Stellen im Programm, an denen Berechnungen ausgeführt werden, können Sie über verschiedene Knöpfe Einfluss darauf nehmen. Diese sind im Folgenden näher erläutert. Bitte beachten Sie jedoch, dass nicht an allen Stellen zwangsläufig alle Funktionen zur Verfügung stehen.

Berechnungseinstellungen

Der Knopf ermöglicht Ihnen, Ihre persönlichen Berechnungseinstellungen zu ändern.

Automatische Berechnungen deaktivieren

Wenn Sie die automatische Berechnung normalerweise aktiviert haben, können Sie die Funktionen mit diesem Knopf temporär nur für die aktuelle Bearbeitung deaktivieren. Ist der Knopf eingedrückt, sind die automatischen Berechnungen derzeit ausgeschaltet. Ein erneuter Klick auf den Knopf schaltet sie wieder ein.

Automatische Berechnungen aktivieren

Haben Sie die Automatik in Ihren persönlichen Einstellungen deaktiviert, steht Ihnen dieser Knopf zur Verfügung. Ein Klick darauf aktiviert die Funktionen dann temporär.

Bitte beachten Sie, dass diese Optionen für das gesamte aktuelle Fenster bzw. die gesamte aktuelle Seite gelten. Eine Unterscheidung z.B. innerhalb einer Seite des Experimentassistenten ist dabei nicht möglich.

Nach dem Verlassen der aktuellen Bearbeitungsmöglichkeit verlieren die temporären Einstellungen Ihre Gültigkeit und werden zurückgesetzt.

Berechnungsvorlage auswählen

Sie können auch bequem eine andere Vorlage (dauerhaft!) für Ihre persönlichen Berechnungseinstellungen übernehmen, indem Sie das Ausklappmenü dieses Knopfes für Berechnungsvorlagen nutzen.

4.7. Edukte von der Berechnung ausschließen

Unter bestimmten Umständen ist es hilfreich, bzw. erforderlich einzelne Edukte gezielt aus der automatischen Berechnung heraus zu nehmen. Umgekehrt können Sie ein bisher ausgeschlossenes Edukt natürlich auch wieder zur automatischen Berechnung hinzufügen.

Die Markierung wird mit den Daten des Eduktes gespeichert, geht also auch für nachfolgende Arbeitsschritte nicht verloren, bzw. wird dauerhaft dokumentiert.

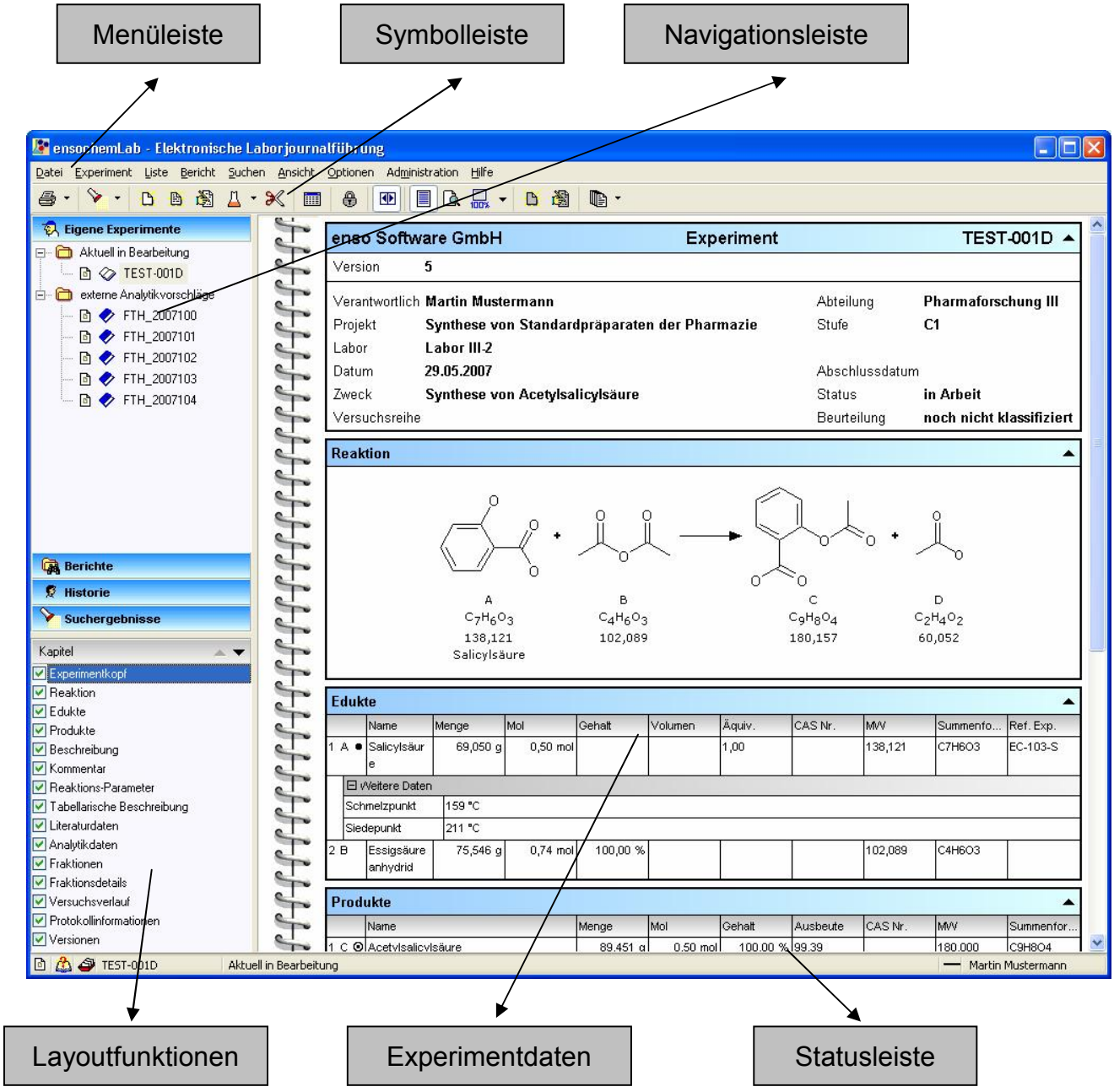
Die Umschaltung können Sie über die Schalterleiste oder das Kontextmenü des Edukts vornehmen.

Zusammenfassung:	Automatische Berechnungen sind nützlich, um bei Änderungen an den Stoffmengen, Äquivalenten usw. einzelner Moleküle schnell die Auswirkungen auf alle anderen Reaktionsteilnehmer zu errechnen. Wichtig ist hierbei jedoch eine auf die jeweiligen Bedürfnisse zugeschnittene Konfiguration, die dem gewünschten Arbeitsablauf entspricht.

5. Das Hauptfenster

Nachdem wir nun ein Experiment in unserer Datenbank haben, ist es ein guter Zeitpunkt, einen genaueren Blick auf das Hauptfenster zu werfen. Im Hauptfenster werden Experimente verwaltet und angezeigt.

Dorthin kommen Sie, nachdem Sie sich angemeldet haben oder aus dem Eingabeassistenten zurückkehren. Nach dem Speichern eines Experiments wird es automatisch in die Anzeige geladen:



5.1. Der Navigator

Das gerade erstellte Experiment finden Sie in der Navigationsleiste auf der linken Fensterseite unter dem Eintrag „Historie“. Es gibt vier verschiedene Kategorien für Experimente:

Eigene Experimente	Dies ist ein Bereich in dem Sie eine frei definierbare, hierarchische Liste von Experimenten pflegen können – Ihr „persönlicher Ordner“
Berichte	Diese Kategorie können Sie verwenden, um Ihre Bericht gesondert von den Experimenten zu gliedern und zu verwalten.
Historie	Die Historie enthält alle in dieser Sitzung neu erstellten oder bearbeiten Experimente, daher auch unser Testexperiment
Suchergebnisse	Hier werden alle Ergebnisse von Suchen nach dem jeweiligen Suchvorgang gespeichert

Alle Kategorien lassen sich mit einem Klick auf den entsprechenden Streifen in der Ordnerleiste auf der linken Seite des Hauptfensters öffnen.

Die Ordner „Eigene Experimente“, „Berichte“ und „Historie“ werden beim Verlassen von ensochemLab gespeichert und stehen Ihnen nach einer erneuten Anmeldung wieder zur Verfügung. Der Ordner „Suchergebnisse“ wird beim Abmelden geleert.

Um ein Experiment aus einem der beiden anderen Ordner in das Verzeichnis „Eigene Experimente“ zu verschieben, gibt es mehrere Möglichkeiten. Über das Kontextmenü stehen die Optionen „Ausschneiden“ und „Kopieren“ zur Verfügung. Es geht natürlich auch noch schneller: Ziehen Sie den Experimentverweis einfach per Drag & Drop in das gewünschte Zielverzeichnis! Um einen Experimentverweis in eine andere Kategorie zu verschieben, pausieren Sie einfach mit der Maus kurz über dem entsprechenden Navigatoreintrag und schon wird er geöffnet.

Wie bereits erwähnt kann dieses Verzeichnis beliebig hierarchisch aufgebaut sein. Dabei unterstützt Sie die Funktion „Neuer Ordner“, die sich ebenfalls im Kontextmenü befindet. Dabei legt ensochemLab einen neuen Ordner an, für den Sie zuerst einen Namen eingeben sollten. Danach können Sie über die bereits vorgestellten Funktionen den Verweis auf Ihr Experiment hinein verschieben.

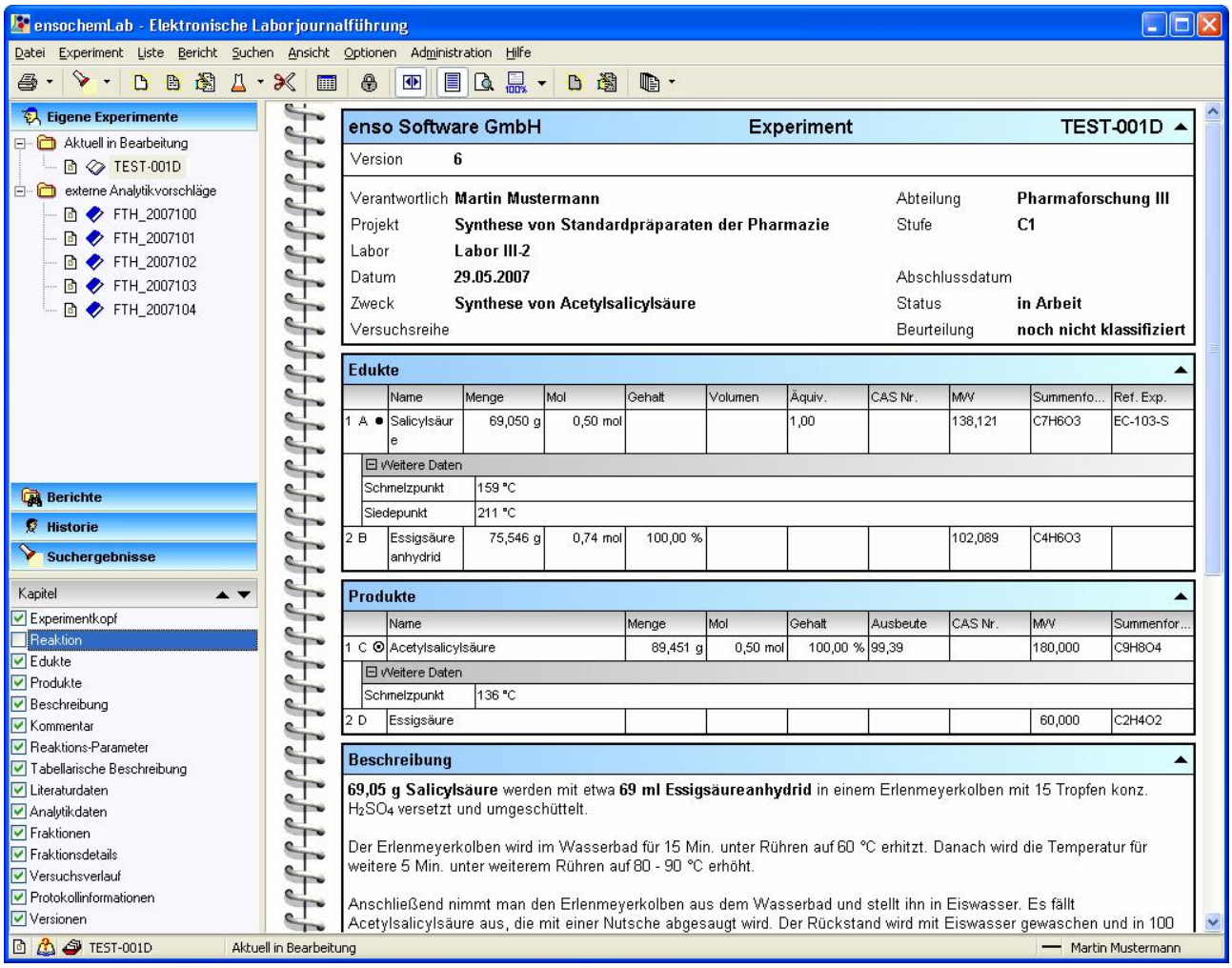
Anmerkung:	Ordner werden immer als Unterelemente des gerade ausgewählten Ordners angelegt.

Sollten Sie zu einem späteren Zeitpunkt mehr als ein Experiment in einem Ordner gespeichert haben, können Sie die Funktionen „Nach oben“ und „Nach unten“ verwenden, um die Reihenfolge Ihrer Experimente zu verändern. Mit „Umbenennen“ können Sie bestehenden Ordnern einen neuen Namen zuweisen.

Anmerkung:	In Ordnern werden nicht die Experimente, sondern lediglich Verweise auf diese gespeichert. Die Funktion „Umbenennen“ kann also nicht den Namen eines Experiments ändern, sondern nur den Ordnereintrag auf ein anderes Experiment umlenken. Genauso kann „Neu“ kein Experiment erstellen – auch hier wird nur mit Verweisen gearbeitet und der Name muss die Experimentnummer eines gültigen Experiments sein.

5.2. Die Experimentanzeige

Auf der rechten Seite des Hauptfensters finden Sie Ihre Experimentdaten. Sie können Kapitel aus- und einblenden. Klicken Sie auf der unteren linken Seite auf den Haken neben „Reaktion“ und sehen Sie was geschieht:


ensochemLab - Elektronische Laborjournalführung
Datei Experiment Liste Bericht Suchen Ansicht Optionen Administration Hilfe
Eigene Experimente
Aktuell in Bearbeitung
TEST-001D
externe Analytikvorschläge
FTH_2007100
FTH_2007101
FTH_2007102
FTH_2007103
FTH_2007104
Berichte
Historie
Suchergebnisse
Kapitel
Experimentkopf
Reaktion
Edukte
Produkte
Beschreibung
Kommentar
Reaktions-Parameter
Tabellarische Beschreibung
Literaturdaten
Analytikdaten
Fraktionen
Fraktionsdetails
Versuchsverlauf
Protokollinformationen
Versionen
enso Software GmbH Experiment TEST-001D
Version 6
Verantwortlich Martin Mustermann
Abteilung Pharmaforschung III
Projekt Synthese von Standardpräparaten der Pharmazie
Stufe C1
Labor Labor III-2
Datum 29.05.2007
Abschlussdatum
Zweck Synthese von Acetylsalicylsäure
Status in Arbeit
Versuchsreihe
Beurteilung noch nicht klassifiziert
Edukte
Name Menge Mol Gehalt Volumen Äquiv. CAS Nr. MW Summenfo... Ref. Exp.
1 A Salicylsäure 69,050 g 0,50 mol 1,00 138,121 C7H6O3 EC-103-S
Weitere Daten
Schmelzpunkt 159 °C
Siedepunkt 211 °C
2 B Essigsäureanhydrid 75,546 g 0,74 mol 100,00 % 102,089 C4H6O3
Produkte
Name Menge Mol Gehalt Ausbeute CAS Nr. MW Summenfor...
1 C Acetylsalicylsäure 89,451 g 0,50 mol 100,00 % 99,39 180,000 C9H8O4
Weitere Daten
Schmelzpunkt 136 °C
2 D Essigsäure 60,000 C2H4O2
Beschreibung
69,05 g Salicylsäure werden mit etwa 69 ml Essigsäureanhydrid in einem Erlenmeyerkolben mit 15 Tropfen konz. H2SO4 versetzt und umgeschüttelt.
Der Erlenmeyerkolben wird im Wasserbad für 15 Min. unter Rühren auf 60 °C erhitzt. Danach wird die Temperatur für weitere 5 Min. unter weiterem Rühren auf 80 - 90 °C erhöht.
Anschließend nimmt man den Erlenmeyerkolben aus dem Wasserbad und stellt ihn in Eiswasser. Es fällt Acetylsalicylsäure aus, die mit einer Nutsche abgesaugt wird. Der Rückstand wird mit Eiswasser gewaschen und in 100
TEST-001D
Aktuell in Bearbeitung
Martin Mustermann

Die Reaktion wurde aus der Anzeige des Experiments entfernt. Sie können sie wieder einfügen, indem Sie den Haken neben dem Eintrag „Reaktion“ wieder setzen.

Anmerkung:	Beim Ausblenden von Kapiteln in der Experimentansicht werden Ihre Daten selbstverständlich nicht gelöscht, sondern nur nicht angezeigt, auch wenn Sie das Programm zwischenzeitlich beenden

Die Liste der Kapitel kann bei Ihnen anders aussehen, da Ihr Administrator für einige Kapitel angeben kann ob sie zur Verfügung stehen.

Sie können die einzelnen Kapitel auch verschieben: Ändern Sie mithilfe der beiden kleinen schwarzen Pfeile einfach die Reihenfolge ihrer Titel in der Liste.

Eine weitere Möglichkeit, Kapitel ein- und auszublenden, ist ein Klick auf den Pfeil in der Kopfzeile des jeweiligen Kapitels. Bei einem auf diese Art ausgeblendeten Kapitel ist die Kopfzeile allerdings grundsätzlich weiterhin sichtbar, wenn auch ohne die zugehörigen Daten. Bitte beachten Sie, dass dies für alle Anzeigemodi gilt (somit auch beim Drucken). Auf diese Funktionen werden wir jedoch später noch zu sprechen kommen.

Die Reaktion wird abhängig von Ihren Einstellungen anders dargestellt. So können Zielmoleküle, Lösungsmittel und Katalysatoren auf Wunsch farblich hervorgehoben werden. Sie können auch die Art der Hervorhebung bestimmen. Nähere Informationen hierüber finden Sie im Kapitel „Anpassen Ihrer Einstellungen“.

In der „normalen“ Experimentanzeige (d.h. nicht in der Druckvorschau) können Sie mit einem Doppelklick auf ein Datenfeld den Experimentassistenten starten. Dieser wird dabei direkt auf der entsprechenden Seite mit dem Eingabefokus im gewählten Feld geöffnet, damit Sie Ihren Datenwert sofort ändern können. Selbstverständlich können Sie aber auch beliebige andere Funktionen des Assistenten nutzen.

Die Anzeige der Edukte und Produkte lässt sich auf zwei Arten einstellen, untereinander und nebeneinander. Verwenden Sie hierzu das Kontextmenü der Experimentanzeige. Sie erreichen es, indem Sie mit der rechten Maustaste an eine beliebige Stelle des Experiments klicken. Da das Kontextmenü sich jedoch nach angeklicktem Kapitel verändert wird und somit nur die darin für das aktuelle Kapitel möglichen Befehle anzeigt, klicken Sie bitte direkt auf die Edukt- oder Produktanzeige:

Der Eintrag „Edukte und Produkte untereinander anzeigen“ stellt Edukte und Produkte untereinander und in getrennten Listen dar. Ist dies bereits der Fall, enthält das Kontextmenü stattdessen den Eintrag „Edukte und Produkte nebeneinander anzeigen“, der die beiden Kapitel wieder zusammenfasst und nebeneinander anordnet. Diese Funktion steht nur in diesem Kapitel zur Verfügung, die anderen beschriebenen Möglichkeiten existieren jedoch analog für alle Kapitel.

Auch die bereits genannten Funktionen zum Ein- und Ausblenden von Kapiteln finden sich im Kontextmenü wieder.

Mit der Funktion „Ansichtstyp ändern“ können Sie festlegen, ob die gerade ausgewählte Tabelle als Tabelle oder als Baumstruktur dargestellt werden soll. Das folgende Bild zeigt ein Edukt als Tabelle:

	Name	Menge	Mol	Gehalt	Volumen	Mol %	CAS Nr.	MW	Summenformel
1 A ●	Salicylsäure	69,050 g	0,50 mol					138,121	C7H6O3

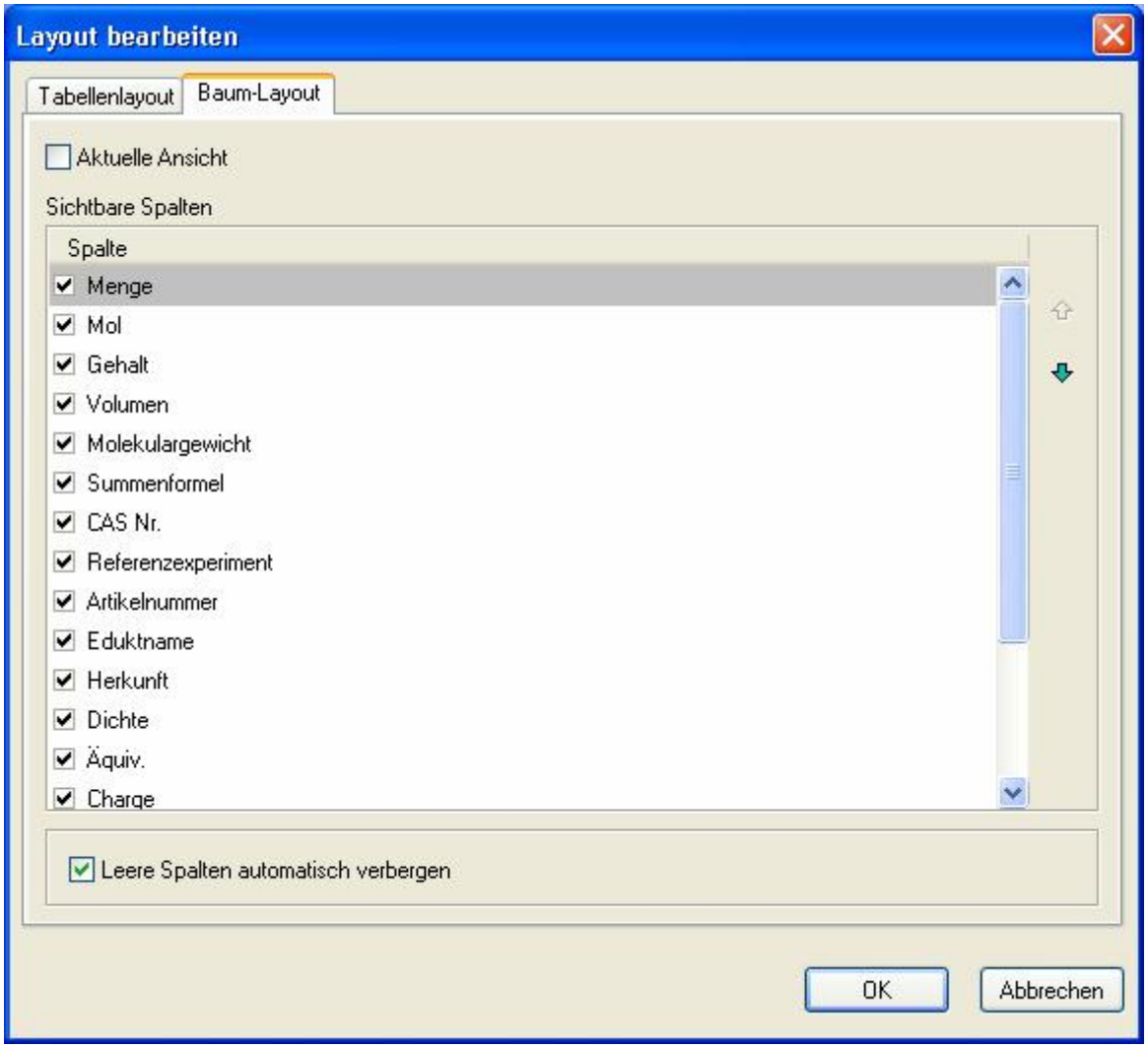
Im Vergleich zur Baumstruktur:

⊟ Edukt 1	●
Menge	69,050 g
Mol	0,49 mol
MW	138,120
Summenformel	C7H6O3
CAS Nr.	69-72-7
Art. Nr.	10003
Name	Salicylsäure
Stöc.	1

Mit den zahlreichen Druckvorschauen von ensochemLab wird sich ein gesondertes Kapitel befassen, daher werden wir an dieser Stelle nicht näher auf dieses Thema eingehen.

Wie Sie eventuell bereits festgestellt haben, befindet sich bei einem der Edukte eine spezielle Markierung. In der Tabellenansicht ist sie in der ersten Spalte angesiedelt, bei der Baumstruktur ganz rechts in der Titelzeile: Der schwarze Punkt (siehe Bilder oben) kennzeichnet das Edukt als Referenzedukt. Zielmoleküle werden im Produktkapitel ähnlich markiert: Mit einem Punkt in einem Kreis. Wenn Sie die Maus über dieses Symbol bewegen, erscheint ein Informationsfenster, das die Struktur und die Namen des Zielmoleküls enthält.

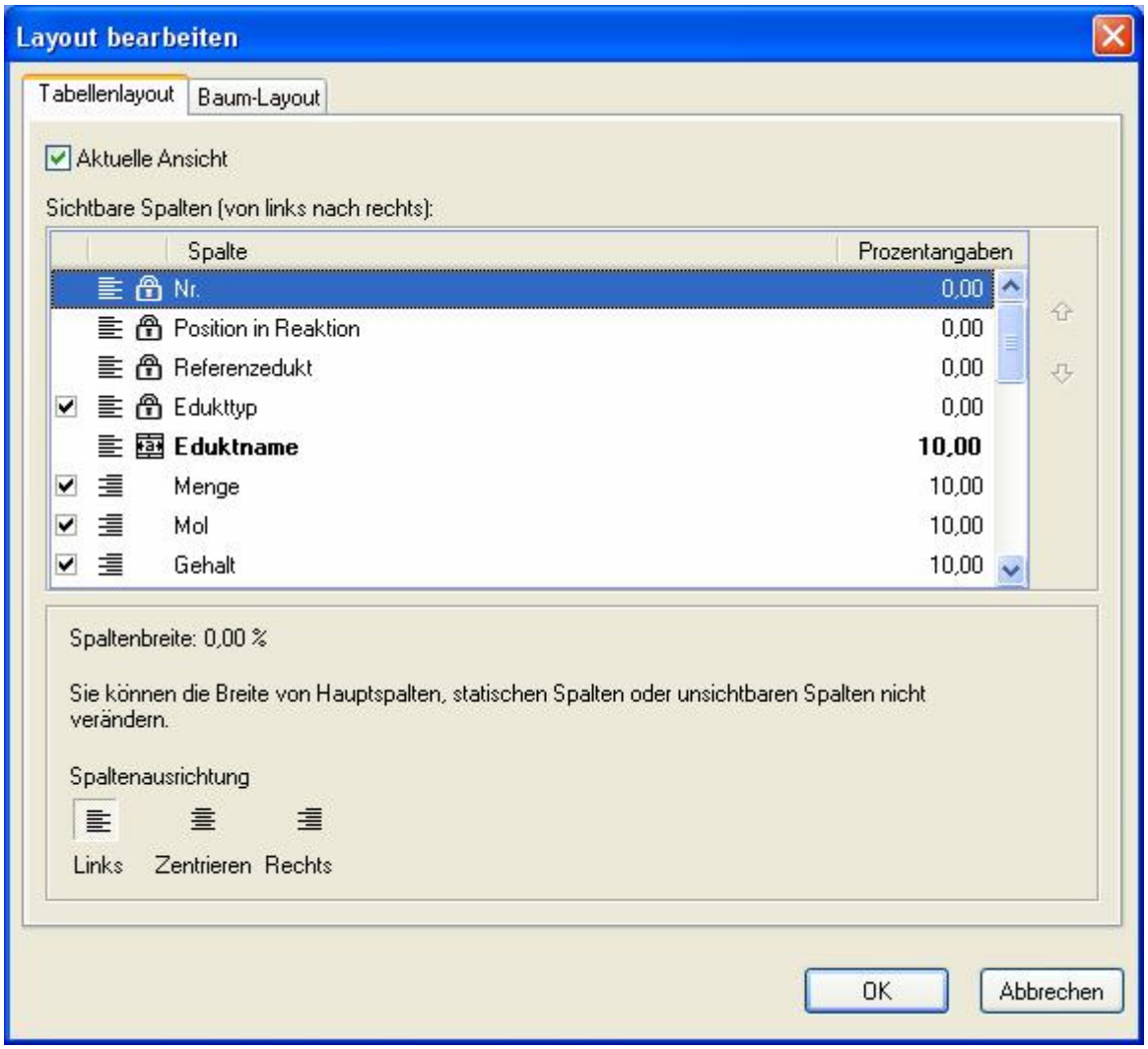
Weitere Möglichkeiten zur Veränderung des Layouts stehen Ihnen mit der Funktion „Layout bearbeiten“ zur Verfügung. Nach einem Klick auf den Eintrag im Kontextmenü öffnet sich das folgende Fenster:



Hier können Sie erneut zwischen Tabellenansicht und Baumstruktur wechseln. Die aktive Darstellung wird mit dem Kästchen „Aktuelle Ansicht“ ausgewählt. In jedem Ansichtstyp können Sie die Reihenfolge der Spalten verändern, indem Sie die beiden Pfeile am rechten Rand des Fensters verwenden.

Wenn Sie eine Spalte in der Auflistung deaktivieren, wird sie nicht mehr in der Experimentanzeige dargestellt.

Bei Verwendung des Tabellenlayouts können Sie zusätzlich noch die Breite jeder Spalte modifizieren, indem Sie zuerst die gewünschte Spalte anklicken und dann den Schiebregler am unteren Rand des Fensters verschieben. Außerdem können Sie zwischen drei Arten der Textausrichtung wählen: Linksbündig, zentriert und rechtsbündig. Klicken Sie einfach auf den entsprechenden Knopf.



Anmerkung:	Die Breiten von Hauptspalten und statischen Spalten können nicht verändert werden. So wird zum Beispiel die Kommentarspalte bei der Anzeige von Analytik verwendet, um den von den anderen Spalten noch verbleibenden Platz aufzufüllen. Außerdem kann die Breite von unsichtbaren (d.h. deaktivierten) Spalten nicht geändert werden.

Daneben gibt es noch einen einfacheren Weg, um die Breite einer Tabellenspalte zu ändern: Ziehen Sie die betreffende rechte Begrenzungslinie in der Anzeige einfach etwas nach rechts oder nach links.

Eine weitere Funktion des Kontextmenüs ist das Bearbeiten des ausgewählten Blocks. Sie öffnet den Assistenten direkt auf der zur Bearbeitung der entsprechenden Daten verwendeten Seite. Außer mit dem Kontextmenü können Sie der Bearbeitung auch noch über einen Doppelklick in einen beliebigen Datensatz in der Anzeige beginnen. Die eigentlichen Änderungen an den Daten werden im bereits ausführlich besprochenen Eingabeassistenten durchgeführt (siehe Kapitel „Erstellen Sie Ihr erstes Experiment“).

Nun sollten wir zu einem anderen Szenario übergehen: Sie haben vor einigen Wochen ein Experiment erstellt und benötigen es nicht regelmäßig. Daher möchten Sie es aus Ihrer Historie löschen. Um dies zu demonstrieren, klicken Sie mit der rechten Maustaste auf das Experiment und dann auf „Löschen“. Bitte beachten Sie, dass dabei **nicht** Ihr **Experiment gelöscht**, sondern lediglich der Verweis auf das Experiment aus der Liste entfernt wird.

Bei verschiedenen Aktionen, zum Beispiel der Übernahme eines Experiments durch einen anderen Benutzer, legt ensochemLab Protokolleinträge an. Wenn Sie ein Administrator sind oder Ihr Administrator die entsprechende Funktion auch für Benutzer freigegeben hat, können Sie diese Informationen anzeigen, indem Sie die Maus über das Protokollsymbol in der Statusleiste bewegen.
Wenn dieses Symbol normalerweise angezeigt wird, bei einem Experiment aber fehlt, bedeutet dies, dass dieses Experiment keine Protokollinformationen besitzt.

5.3. Binärdaten anzeigen und verwalten

Normalerweise zeigt ensochemLab die in ein Experiment eingebetteten Binärdaten wie z.B. Bilder oder PDF Dokumente automatisch an. Je nach Ihrer aktuellen Einstellung kann in der Experimentanzeige anstatt eines Vorschaubildes für einen Binärdatensatz allerdings auch nur ein Platzhalter angezeigt werden:

In diesem Fall kann es sein, dass die Größe der entsprechenden Binärdatei die Maximalgröße für den automatischen Download übersteigt. Klicken Sie daher bitte mit der rechten Maustaste auf den Platzhalter und wählen Sie dann „Binärdatei vom Server laden“, um den Anhang manuell herunter zu laden:

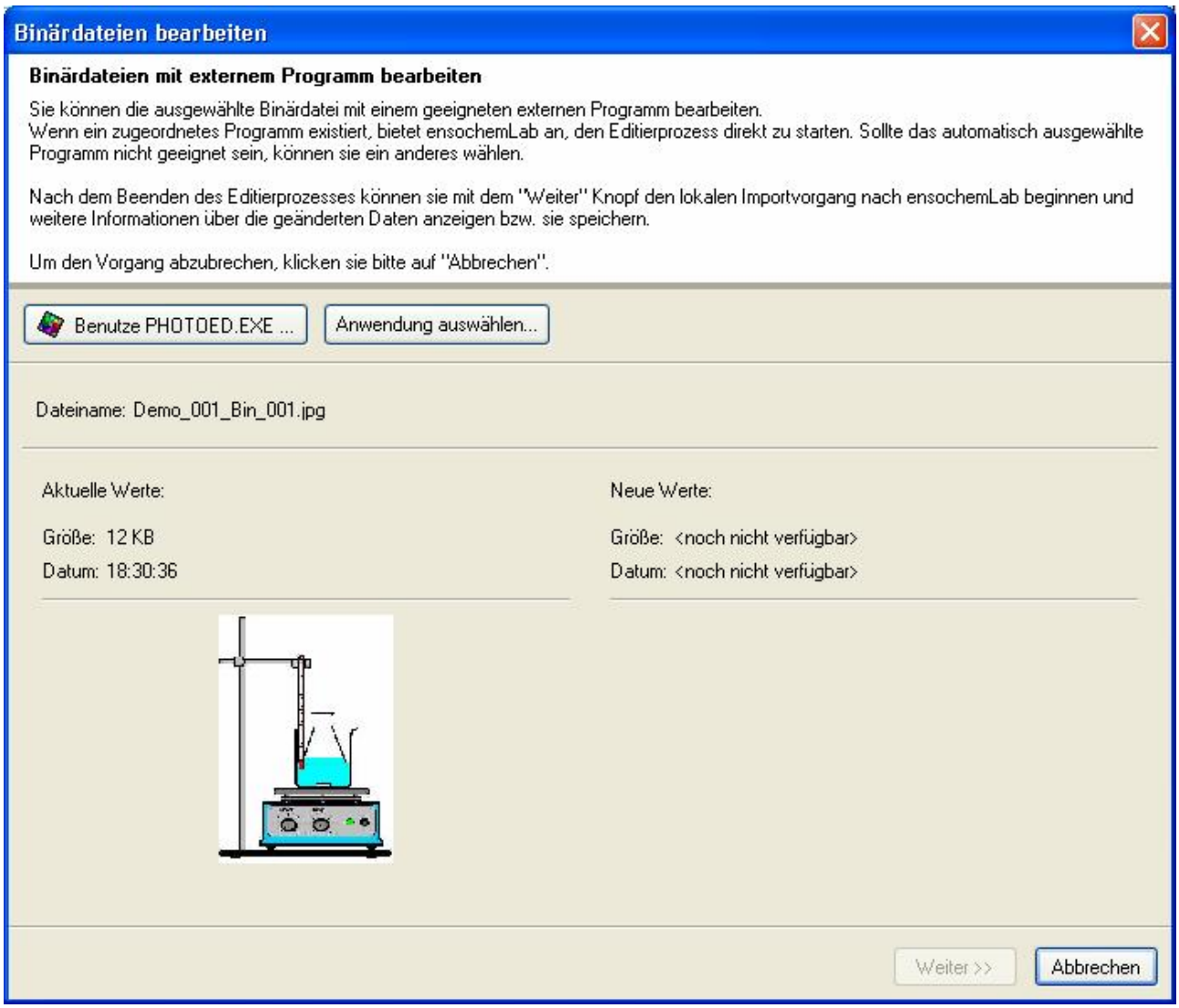
Der Datensatz wird, falls es sich um eine Bilddatei in einem der unterstützten Bildformate handelt, nun als Vorschau angezeigt. Diese Funktion ermöglicht Ihnen, nur die Binärdateien vom Server zu laden, die sie wirklich benötigen. Dies kann speziell bei langsameren Anbindungen an den ensochemLab Server möglich sein.

Sie können die aktuellen Einstellungen, bis zu welcher Grenze Binärdateien automatisch herunter geladen werden, in Ihren persönlichen Einstellungen einsehen. Falls Ihr Administrator die entsprechende Funktion aktiviert hat können Sie auch einen eigenen Wert angeben oder entscheiden, dass immer bzw. niemals ein automatischer Download erfolgen soll.

Bitte beachten Sie, dass bei nicht unterstützen Bild- oder anderen Dateiformaten selbstverständlich auch mit dem manuellen Download keine Anzeige möglich ist.

Um eine angehängte Binärdatei zu bearbeiten, könnten Sie diese theoretisch unter Verwendung des Experimentassistenten exportieren, bearbeiten und danach zurück in Ihr Experiment importieren. Doch es geht auch einfacher: Verwenden Sie einfach den Eintrag „Binärdaten bearbeiten“ aus dem Kontextmenü des Vorschaubilds oder Platzhalters.

Es wird ein spezieller Dialog gestartet, in dem Sie die Bearbeitung steuern können:


Binärdateien bearbeiten
Binärdateien mit externem Programm bearbeiten
Sie können die ausgewählte Binärdatei mit einem geeigneten externen Programm bearbeiten.
Wenn ein zugeordnetes Programm existiert, bietet ensochemLab an, den Editierprozess direkt zu starten. Sollte das automatisch ausgewählte Programm nicht geeignet sein, können sie ein anderes wählen.
Nach dem Beenden des Editierprozesses können sie mit dem "Weiter" Knopf den lokalen Importvorgang nach ensochemLab beginnen und weitere Informationen über die geänderten Daten anzeigen bzw. sie speichern.
Um den Vorgang abzubrechen, klicken sie bitte auf "Abbrechen".
Benutze PHOTOED.EXE ...
Anwendung auswählen...
Dateiname: Demo_001_Bin_001.jpg
Aktuelle Werte:
Größe: 12 KB
Datum: 18:30:36
Neue Werte:
Größe: <noch nicht verfügbar>
Datum: <noch nicht verfügbar>
Weiter >>
Abbrechen

In der linken Spalte sehen Sie unter der Überschrift „Aktuelle Werte“ die aktuellen Eigenschaften Ihrer Datei. Dabei werden die Größe sowie das Datum der letzten der letzten Änderung angezeigt. Falls möglich, sehen Sie unterhalb dieser Daten ein Vorschaubild.

ensochemLab ermittelt automatisch das Programm, das auf dem lokalen Computer mit dem Dateityp der zu bearbeitenden Datei verknüpft ist. Mit einem Klick auf „Benutze …“, können Sie diese Standardauswahl verwenden. Wenn Sie ein anderes Programm benutzen möchten, klicken Sie bitte auf „Anwendung auswählen“.

Danach wird das gewählte Programm gestartet und Sie können es wie gewöhnlich nutzen.

Nachdem Sie die Bearbeitung der Datei abgeschlossen haben, schließen Sie bitte Ihr Programm und bestätigen Sie bitte etwaige Rückfragen, ob die Änderungen gespeichert werden sollen, mit „Ja“. Bitte beachten Sie jedoch, dass Ihre Änderungen nicht übernommen werden, wenn Sie Ihre Datei unter einem anderen Namen oder an einem anderen Ort speichern.

Klicken Sie in ensochemLab auf „Weiter“, um fortzufahren.

Das Programm übernimmt nun die neuen Daten in die Tabelle auf der rechten Seite des Fensters. So können Sie Ihre Datei vor und nach der Änderung direkt vergleichen. Mit einem Klick auf „OK“ speichern Sie den Binärdatensatz, mit „Abbrechen“ gelangen Sie zum Hauptfenster zurück, ohne Ihre Änderungen zu übernehmen.

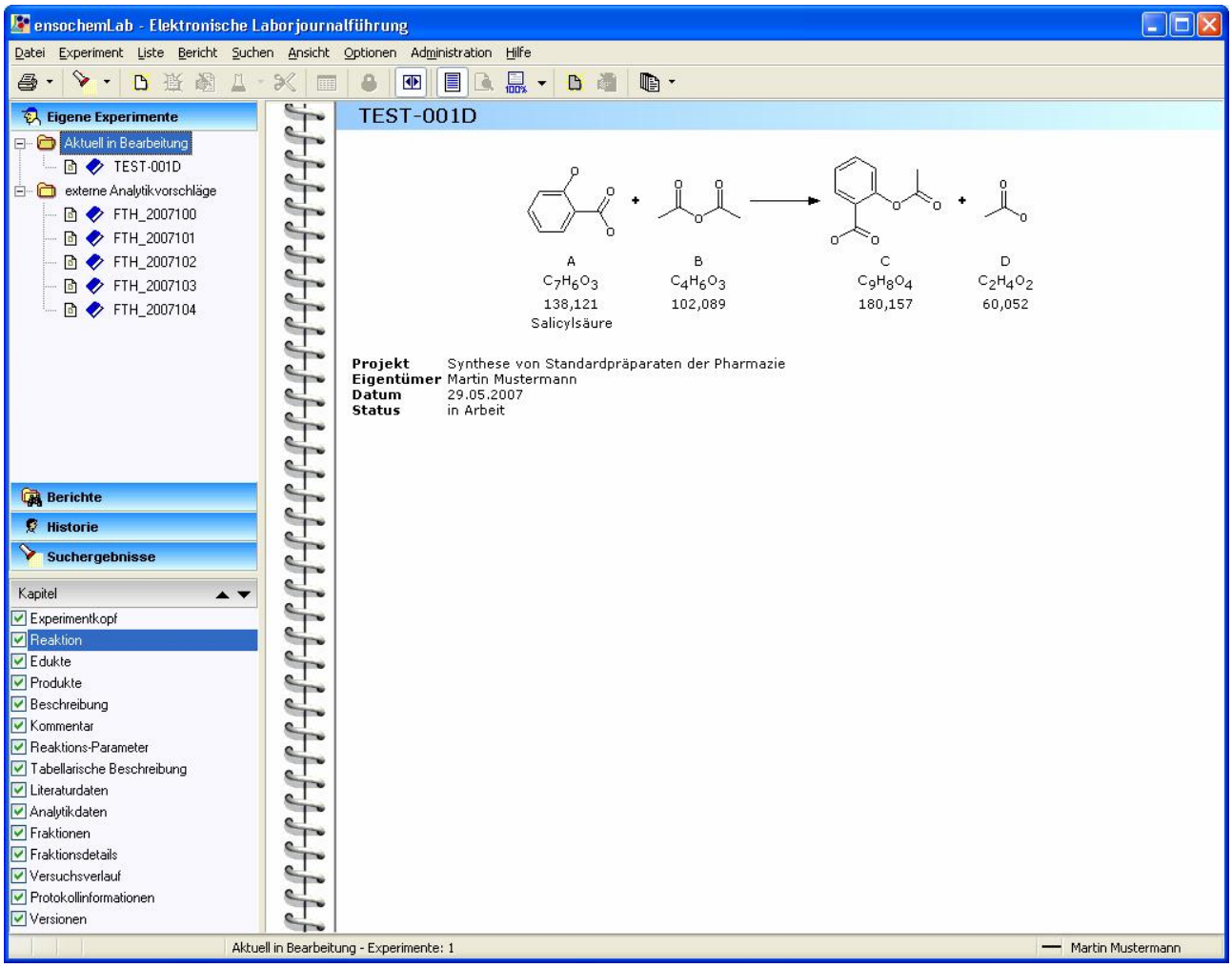
Wenn Sie Ihre Binärdatei nur auf die Festplatte speichern möchten, benötigen Sie diesen Dialog nicht. Das Kontextmenü der Experimentanzeige bietet Ihnen hierfür die Funktion „Binärdateien speichern“.

Um die Binärdatei mit dem lokalen Standardprogramm für diesen Dateityp zu öffnen, können Sie entweder auf dem Vorschaubild doppelklicken oder den Eintrag „Binärdatei öffnen“ aus dem Kontextmenü verwenden. Wenn Sie anstelle des Standardprogramms eine andere Anwendung benutzen möchten, klicken Sie bitte auf „Binärdatei öffnen mit“. Es erscheint ein Dialog, in dem Sie das gewünschte Programm auswählen können.

Bitte beachten Sie jedoch, dass diese Funktionen nur zum Betrachten der Datei geeignet sind und etwaige Änderungen nicht übernommen werden.

5.4. Die Ordnerübersicht

Einen vollständig anderen Anzeigemodus finden Sie, wenn in der Liste auf der linken Seite des Hauptfensters statt einem Experiment ein Ordner ausgewählt ist. ensochemLab zeigt in diesem Fall eine Übersicht über die Experimente in diesem Ordner an:



Um zu einem der angezeigten Experimente zu wechseln, können Sie entweder auf der entsprechenden Reaktion doppelklicken oder den Befehl „Experiment in Navigator auswählen“ aus dem Kontextmenü.

Unter Umständen verfügt Ihr Unternehmen auch über eine speziell für Sie angepasste Ordnerübersicht, die dann nicht dem hier gezeigten Beispiel der Standardversion entspricht.

5.5. Die Versionsverwaltung

Die in diesem Unterkapitel beschriebenen Funktionen stehen nur zur Verfügung, wenn das optionale Modul für die Versionsverwaltung auf Ihrem ensochemLab Server installiert ist. Auskünfte erteilt im Zweifelsfall Ihr Administrator oder Betreuer.

Je nach Einstellung erstellt ensochemLab zu verschiedenen Zeitpunkten automatisch eine neue Experimentversion. Eine Version ist hierbei ein Schnappschuss eines Experiments mit allen seinen Daten zu einem bestimmten Zeitpunkt. Dieser Schnappschuss ist „eingefroren“, d.h. es können keine Änderungen mehr an ihm vorgenommen werden. Änderungen sind immer nur an der jeweils aktuellen Version möglich. Es ist daher auch nicht möglich, eine oder alle vorherigen Versionen eines Experiments zu löschen.

Ihr Administrator hat hierbei eine der folgenden Einstellungen für den Archivierungszeitpunkt aktiviert. Bitte beachten Sie, dass einige der Werte auch kombiniert werden können.

Niemals	Es werden niemals neue Versionen eines Experiments erstellt – die Versionsverwaltung ist ausgeschaltet.
Beim Abschließen	Eine neue Version wird bei jeder Änderung am Experiment erstellt, sofern das Experiment bereits mindestens einmal im Status „abgeschlossen“ war.
Beim Besitzerwechsel	Eine neue Version wird immer dann erstellt, wenn das Experiment den Besitzer wechselt.
Immer	Eine neue Version wird bei jeder Änderung am Experiment sowie beim jedem Besitzerwechsel erstellt.

Über das Hauptfenster von ensochemLab können Sie auf frühere, gespeicherte Experimentversionen zugreifen.

Wenn Sie die entsprechende Option in Ihren persönlichen Einstellungen aktiviert haben, können Sie diese als untergeordnete Knoten zum entsprechenden Experimenteintrag in der Navigationsleiste finden.

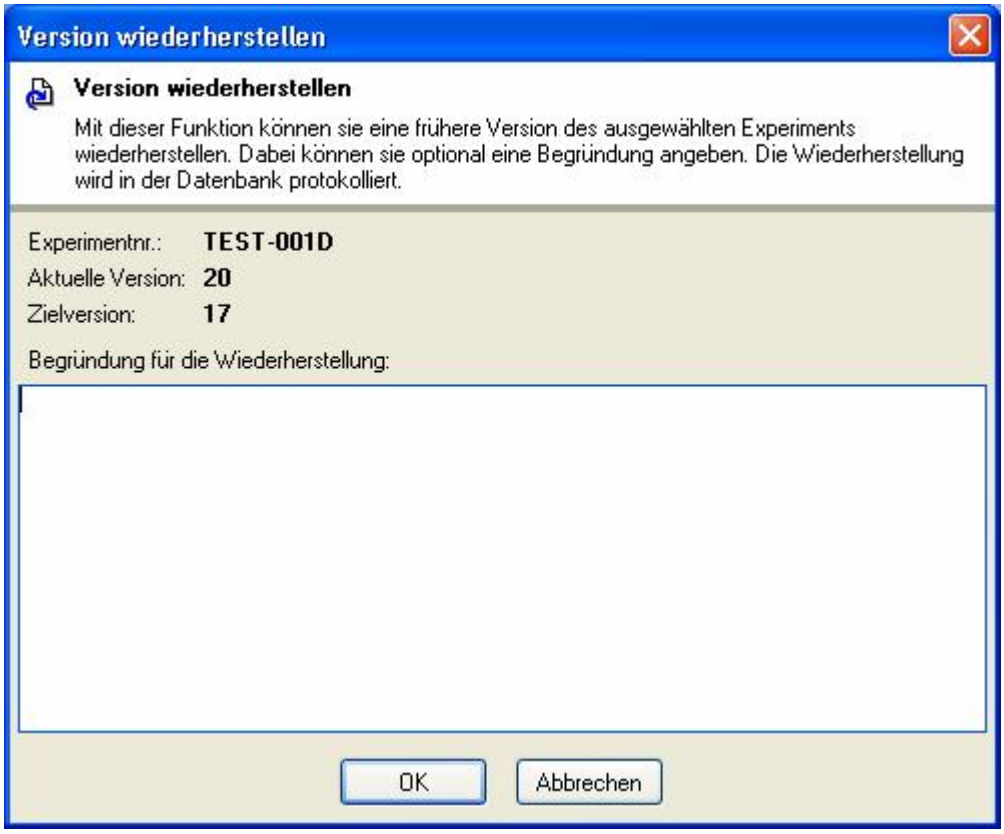
Unabhängig von der Konfiguration zeigt ensochemLab wenn Versionen existieren aber auch ein Symbol in der Statusleiste an, auf das Sie klicken können, um die anzuzeigende Version auf einem aufklappenden Menü auszuwählen.

Hier sehen Sie aber nur die zehn neuesten Versionen. Wenn Sie eine ältere Version anzeigen möchten, klicken Sie bitte auf den Eintrag „Ältere Versionen“. Es erscheint ein Dialog, in dem Sie für sämtliche existierenden Versionen des Experiments jeweils die Versionsnummer, den Benutzer, der die Erstellung der Version ausgelöst hat, sowie das zugehörige Erstellungsdatum finden. Um eine Version anzuzeigen, wählen Sie diese bitte aus der Liste aus und klicken Sie anschließend auf „OK“.

Um zur aktuellen Arbeitsversion zurückzukehren enthält das Kontextmenü des Versionssymbols den Eintrag „Aktuelle Version“.

Sie können ältere Versionen auch wiederherstellen. Dies bedeutet, dass die alte Version zur aktuellen Arbeitsversion wird. Die bisherige Arbeitsversion wird dann als zweitneueste Version archiviert.

Wählen Sie dazu einfach die entsprechende Version aus und klicken Sie im Hauptmenü unter „Experiment“ auf „Version wiederherstellen“. Dabei wird das folgende Fenster angezeigt:


Version wiederherstellen
Version wiederherstellen
Mit dieser Funktion können sie eine frühere Version des ausgewählten Experiments wiederherstellen. Dabei können sie optional eine Begründung angeben. Die Wiederherstellung wird in der Datenbank protokolliert.
Experimentnr.: TEST-001D
Aktuelle Version: 20
Zielversion: 17
Begründung für die Wiederherstellung:
OK
Abbrechen

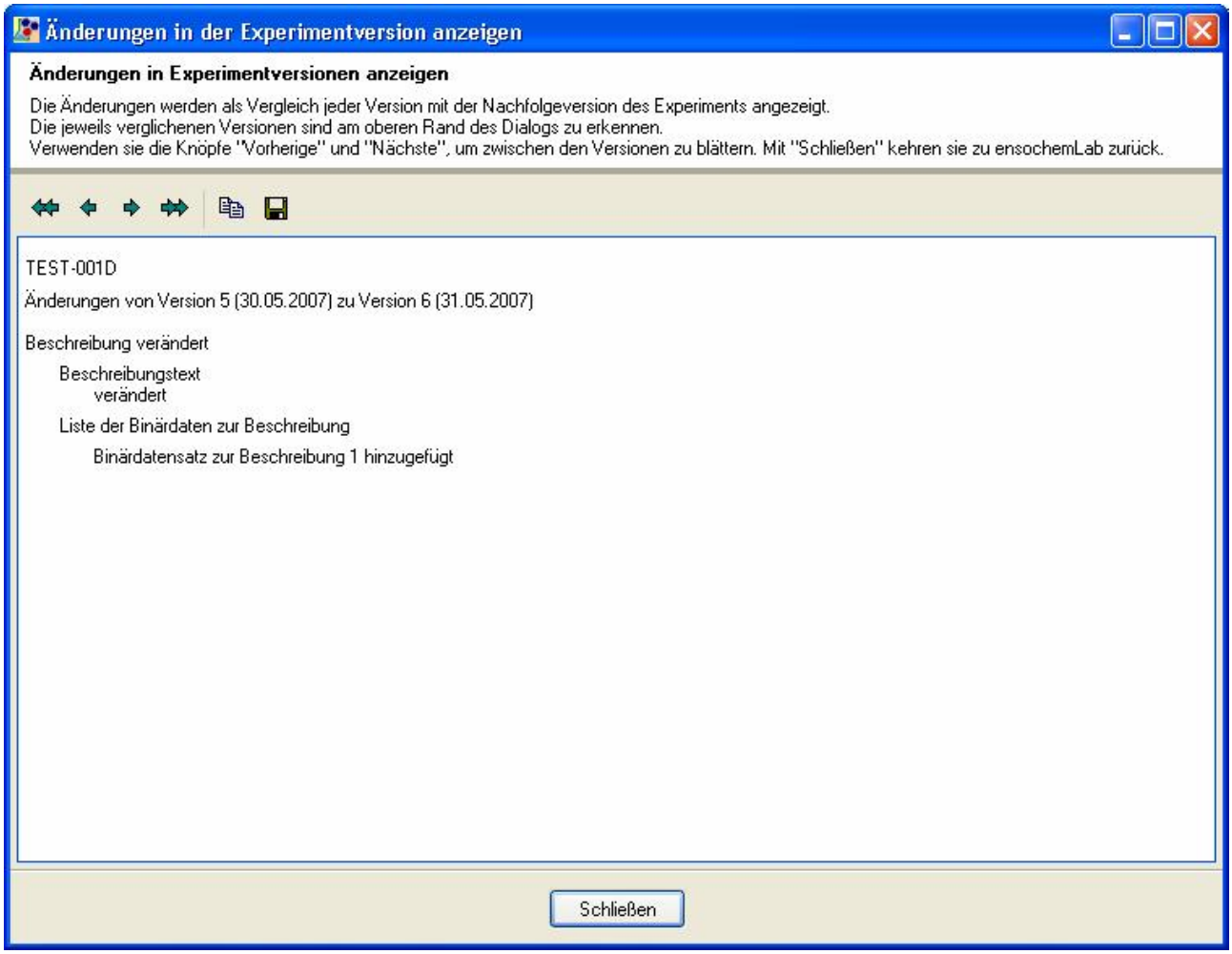
ensochemLab erstellt bei der Wiederherstellung einer alten Version grundsätzlich einen Eintrag im Experimentprotokoll. Wenn Sie in diesem Dialog eine optionale Begründung eingeben, wird diese in den Protokolleintrag aufgenommen.

Zusätzlich sehen Sie noch einmal die aktuelle Experimentnummer, die Version, die Sie wiederherstellen möchten, sowie die Nummer der Version, die gerade verwendet wird.

Ein spezielles Kapitel in der Experimentanzeige listet alle archivierten Versionen des Experiments auf, zusammen mit dem Archivierungsdatum und dem Namen des Benutzers, der die Archivierung ausgelöst hat. Auch von hier aus können Sie per Kontextmenü auf vorherige Versionen zugreifen.
Diese Liste können Sie auch in die Zwischenablage kopieren oder als CSV-Datei exportieren.

Mit dem Befehl „Änderungen der Version anzeigen“, den Sie im Hauptmenü unter „Experiment“ sowie im Kontextmenü des Versionsblocks finden, können Sie eine Version eines Experiments systematisch mit seiner Folgeversion vergleichen. Ein Vergleich zwischen nicht aufeinander folgenden Versionen ist leider nicht möglich.

Der Beschreibungsdialog sieht wie folgt aus:


Änderungen in der Experimentversion anzeigen
Änderungen in Experimentversionen anzeigen
Die Änderungen werden als Vergleich jeder Version mit der Nachfolgeversion des Experiments angezeigt.
Die jeweils verglichenen Versionen sind am oberen Rand des Dialogs zu erkennen.
Verwenden sie die Knöpfe "Vorherige" und "Nächste", um zwischen den Versionen zu blättern. Mit "Schließen" kehren sie zu ensochemLab zurück.
TEST-001D
Änderungen von Version 5 (30.05.2007) zu Version 6 (31.05.2007)
Beschreibung verändert
Beschreibungstext verändert
Liste der Binärdaten zur Beschreibung
Binärdatensatz zur Beschreibung 1 hinzugefügt
Schließen

In der ersten Zeile sehen Sie die Experimentnummer. Die zweite Zeile beschreibt die verglichenen Versionen mit ihrer jeweiligen Versionsnummer und dem zugehörigen Erstellungsdatum. Im folgenden Text werden dann hierarchisch sortiert die jeweiligen Änderungen aufgelistet.

Mit den Knöpfen in der Symbolleiste können Sie zwischen den zu vergleichenden Experimentversionen blättern. Wird also wie im Beispiel gerade Version 5 mit Version 6 verglichen, so können Sie mit einem Klick auf „Vorherige Änderungen anzeigen“ zum Vergleich von Version 4 mit Version 5 blättern. Mit einem Klick auf „Nächste Änderungen anzeigen“ gelangen Sie anschließend zurück zu Version 5 / 6.

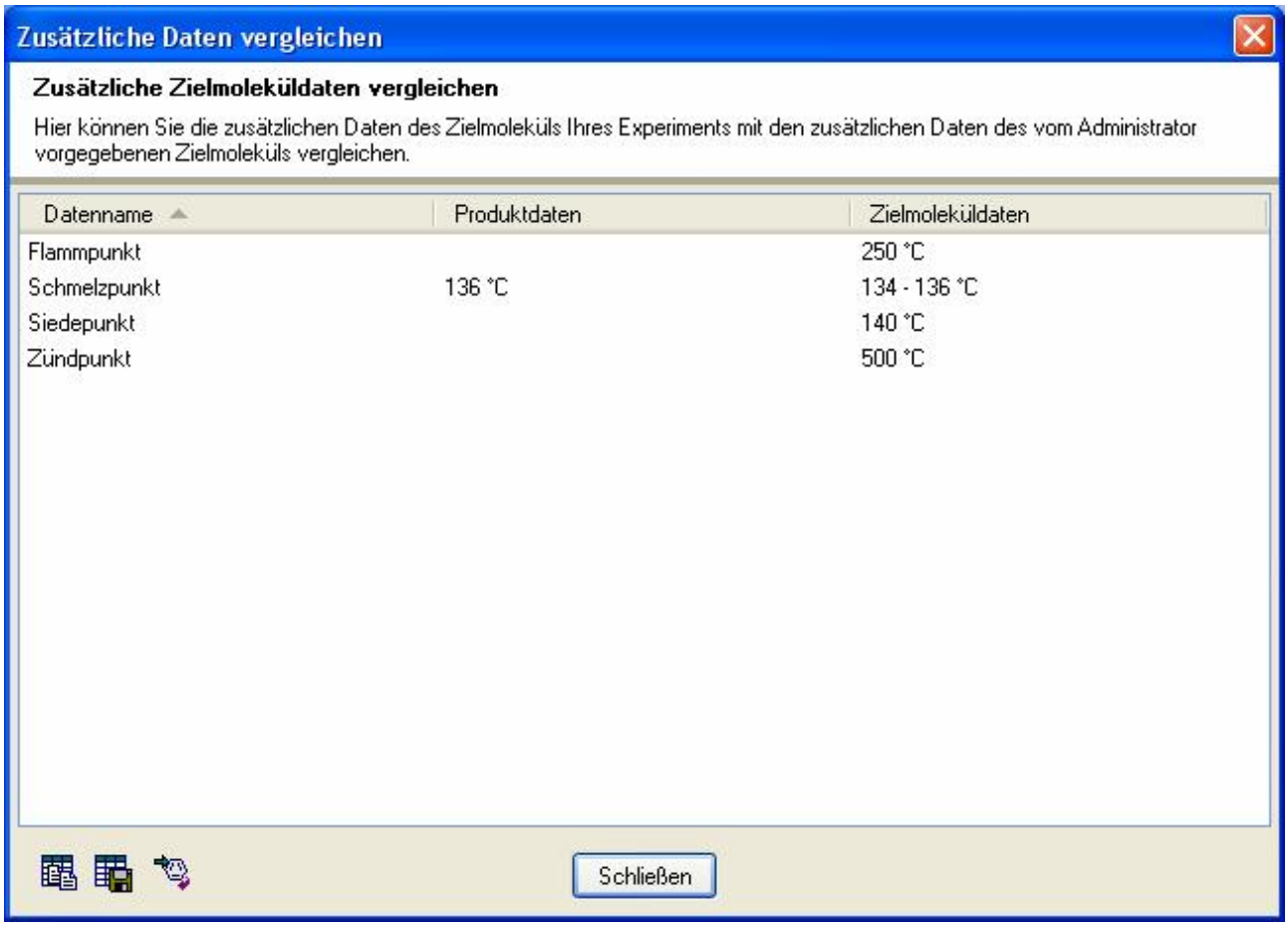
Mit dem Knopf „Erste Änderungen anzeigen“ vergleichen Sie die ersten beiden, mit „Letzte Änderungen anzeigen“, die letzten beiden Versionen des Experiments.

Um den Text mit der Änderungsbeschreibung in die Zwischenablage zu kopieren, klicken Sie bitte auf „Änderungen in die Zwischenablage kopieren“. Mit „Änderungen in Datei exportieren“, können Sie den Änderungstext in eine Textdatei speichern.

5.6. Produktdaten mit Zielmolekül vergleichen

Wie Sie bereits gesehen haben, können Sie, wenn Sie ein Produkt als Zielmolekül markieren, zusätzliche, vom Administrator definierte Zielmoleküldaten in Ihr Produkt kopieren. Dabei handelt es sich jedoch nur um eine Kopie. Spätere Änderungen an den Daten des Zielmoleküls ändern in keinem Fall Ihr Produkt, wodurch zum Beispiel zwischen theoretischen Soll-Werten (Zielmolekül) und gemessenen Ist-Werten (Produkt) unterschieden werden kann.

Wenn Sie nun die Daten Ihres Produkts mit denen des Zielmoleküls vergleichen möchten, wählen Sie bitte das entsprechende Experiment im Navigator aus und klicken Sie dann im Hauptmenü unter „Experiment“ auf „Mit Zielmolekül vergleichen“. Es erscheint ein Dialog mit einer tabellarischen Übersicht über alle Unterschiede:



Dies ist lediglich eine Ansicht, direkte Änderungen an den Daten sind hier nicht möglich. Hierfür steht Ihnen der bereits in einem früheren Kapitel beschriebene Eingabeassistent zur Verfügung.

Um die Tabelle nach einer Spalte zu sortieren, klicken Sie bitte einfach auf die entsprechende Überschrift. Mit einem erneuten Klick können Sie die Sortierrichtung (Aufsteigend / Absteigend) ändern.

Mit dem Knopf „In die Zwischenablage kopieren“ können Sie die angezeigten Daten zur weiteren Verarbeitung in einem externen Programm in die Zwischenablage kopieren. Mit der Funktion „Exportieren“ können Sie die Daten in eine CSV-Datei speichern.

Für den Fall dass Sie das aktuelle Experiment verändern dürfen, können Sie bei Unterschieden zwischen Produkt- und Zielmoleküldaten mit dem Knopf „Die weiteren Daten übernehmen" einen Dialog starten. Dieser erlaubt es Ihnen gezielt, für das Zielmolekül definierte Werte, dem ausgewählten Produkt zuzuweisen. Änderungen werden direkt in die Datenbank geschrieben.

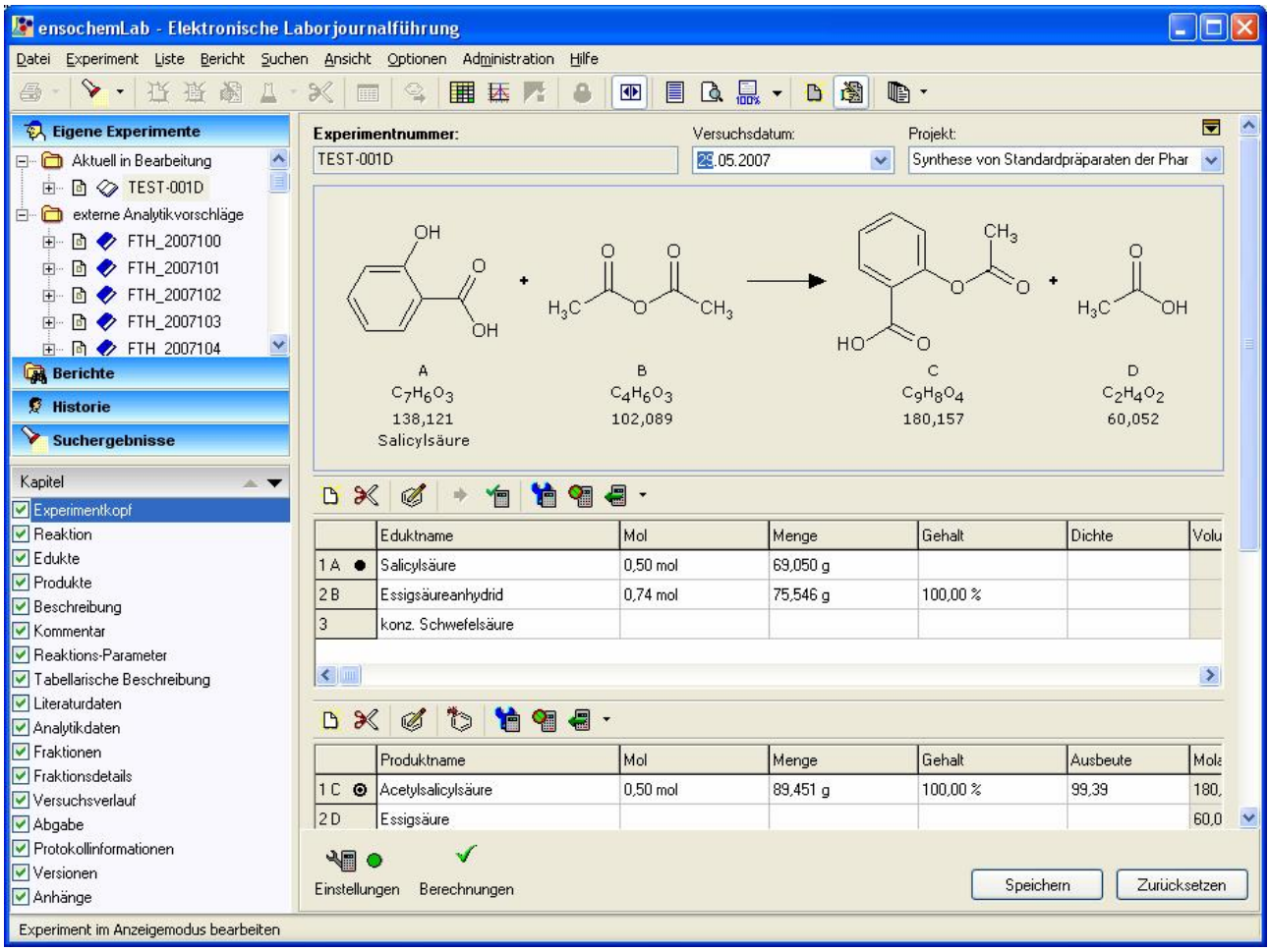
Zusammenfassung:	Das Hauptfenster zeigt Experimente an und verwaltet sie. Die Suchfunktionen werden ebenfalls von hier aus aufgerufen. Der Navigator bietet eine Übersicht über Ihre Experimente. Die dort durchgeführten Aktionen ändern niemals das Experiment selbst sondern nur Verweise auf das Experiment.

6. Die Direkteingabe

In einem der vorherigen Kapitel haben Sie gesehen, wie Experimente bequem mit Hilfe des Eingabeassistenten angelegt werden möchten. In bestimmten Fällen wird diese Funktionsvielfalt aber gar nicht benötigt – wenn Sie zum Beispiel für zehn Experimente jeweils nur die Ausbeute nachtragen möchten, empfiehlt sich ein anderer Modus, der schnelleren Zugriff auf die wichtigsten Kerndaten ermöglicht.

Dieser Modus ist die Direkteingabe. Alle Daten werden auf einer einzigen Seite innerhalb des ensochemLab Hauptfensters angezeigt und können auch direkt dort bearbeitet werden. Um ein neues Experiment in der Direkteingabe zu erstellen, klicken Sie bitte auf den Knopf „Neues Experiment in Anzeige“ in der Symbolleiste des Hauptfensters. Wenn Sie das aktuell im Navigator ausgewählte Experiment auf diese Art bearbeiten möchten, klicken Sie bitte auf „Experiment in Anzeige bearbeiten“.

In jedem Fall wird die gerade eingestellte Ansicht (Experiment, Bericht, Druckvorschau usw.) auf der rechten Seite des Fensters gegen den Eingabemodus ausgetauscht:



Wie Sie sehen, stehen nur die wichtigsten Datenfelder zur Verfügung. Die Bearbeitung der Reaktion erfolgt genau wie im Eingabeassistenten.

Der erste wirkliche Unterschied findet sich bei den Edukten: Diese werden als Tabelle ohne Struktur angezeigt. Um einen Wert auszutauschen, ändern Sie bitte einfach den Inhalt der entsprechenden Zelle. Um nun aber die Struktur anzuzeigen oder zu verändern, wählen Sie bitte die gewünschte Zeile aus und klicken Sie dann auf den Knopf „Struktur bearbeiten“ in der Symbolleiste. Der von Ihnen eingestellte Chemieeditor wird mit der Eduktstruktur geöffnet.

Mit dem Knopf „Edukt hinzufügen“ können Sie ein neues Edukt in der Liste erstellen. Die Funktion „Edukt löschen“ entfernt das aktuelle Edukt. Bitte beachten Sie jedoch, dass während der eigentlichen Dateneingabe (also während Sie sich in einem Feld befinden) diese Knöpfe der Symbolleiste aus Sicherheitsgründen deaktiviert sind. Um ein Edukt als Referenzedukt festzulegen, wählen Sie es bitte aus und klicken anschließend auf den Knopf „Als Referenzedukt markieren“.

Die (automatischen) Berechnungsfunktionen stehen Ihnen in der Direkteingabe genauso wie im Eingabeassistenten zur Verfügung und hängen von Ihren aktuellen Benutzereinstellungen ab. Nähere Details hierzu werden in einem gesonderten Kapitel behandelt.

Die Produkttabelle ist vollkommen analog zur Edukttabelle aufgebaut. Zusätzlich finden Sie hier in der Symbolleiste noch die Funktionen, um Zielmoleküle zu registrieren bzw. die Zuordnungen wieder zu entfernen. Bei einem Klick auf einen dieser Knöpfe werden die gleichen Funktionen ausgeführt wie im Eingabeassistenten, es wird auch der gleiche Registrierungsassistent verwendet.

Im unteren Bereich der Direkteingabe finden Sie das Feld für die Beschreibung. Sie können hier jedoch keine Binärdaten anhängen, austauschen oder löschen. Die Funktionen zur Textbearbeitung sind im Kapitel über den Eingabeassistenten näher erläutert. Wenn Sie einen größeren Bereich Ihres Texts sehen möchten ohne zu scrollen, können Sie das Textfeld nach unten hin vergrößern, indem Sie auf „Textfeld vergrößern“ klicken. Ein Klick auf „Textfeld verkleinern“ macht dies wieder rückgängig. Insgesamt ist eine achtmalige Vergrößerung möglich. Wenn Sie einen Textbaustein in Ihre Beschreibung einfügen möchten, klicken Sie bitte auf „Textbausteine“. Es erscheint das bereits bekannte Fenster für Textbausteine, aus dem Sie auch hier den Baustein entweder per Doppelklick oder über den Knopf „Einfügen“ in Ihren Text einfügen können.

Unabhängig von Ihrer aktuellen Scrollposition ist ganz unten immer eine Leiste mit zwei Symbolen und zwei Knöpfen sichtbar.

Das Symbol ganz links zeigt, wenn Sie die Maus darüber bewegen, ein Hinweisfenster mit einer Aufstellung Ihrer aktuellen Berechnungseinstellungen an. Rechts neben dem stilisierten Taschenrechner sehen Sie ein Symbol, das den Status der automatischen Berechnung angibt, wie es im Kapitel über die Berechnungen näher erläutert ist.

Das rechte Symbol gibt an, ob die letzte Berechnung im gesamten „Dokument“ erfolgreich durchgeführt werden konnte. Weitere Informationen zu Fehlern, Warnungen oder Hinweisen erhalten Sie, wenn Sie die Maus darüber bewegen.

Mit den beiden Knöpfen können Sie Ihre Änderungen entweder abspeichern oder verwerfen. Sie verbleiben danach immer im Bearbeitungsmodus, nach einem Klick auf „Wiederherstellen“ werden jedoch wieder die ursprünglichen Daten angezeigt.

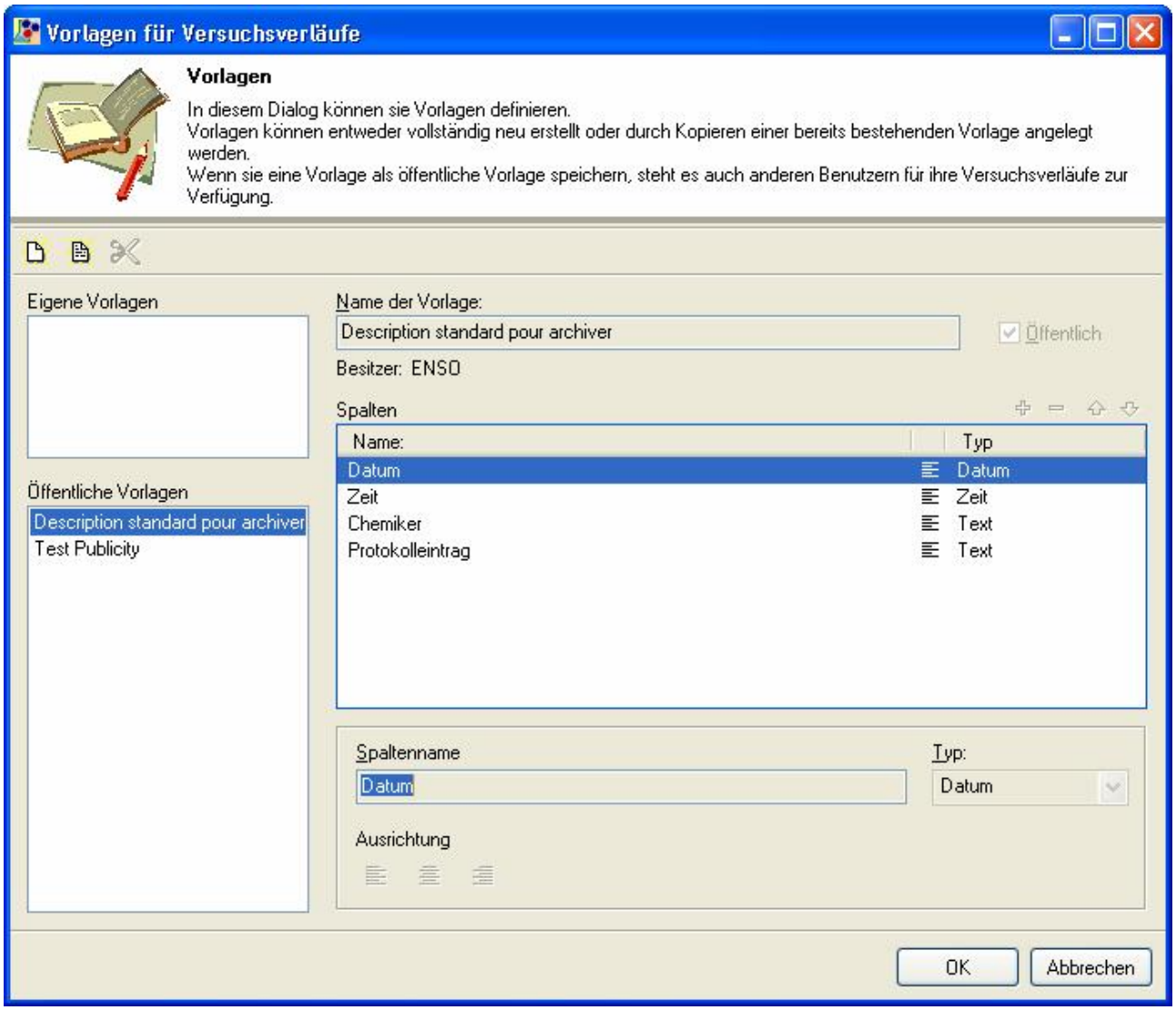
Zusammenfassung:	Die Direkteingabe stellt eine Erweiterung zum Eingabeassistenten dar, mit der Sie bequem Versuchsergebnisse oder Anmerkungen in größerer Anzahl nachtragen können. Auch eine Erstellung neuer Experimente mit verschiedenen Rumpfdaten ist möglich.

7. Arbeiten mit Versuchsverläufen

Nun haben Sie ein Beispielexperiment in der Datenbank gespeichert und kennen die wichtigsten Funktionen des Hauptmenüs. Es ist nun an der Zeit, noch einen letzten Teil des Experiments nachzutragen, den wir noch nicht eingegeben haben: den Versuchsverlauf.

Im Gegensatz zur tabellarischen Beschreibung bietet der Versuchsverlauf flexible Spalten, d.h. die können beliebig viele Spalten mit verschiedenen Spaltentypen und Namen anlegen. Diese Flexibilität hat den Preis, dass nach den Daten des Versuchverlaufs nicht gesucht werden kann.

ensochemLab bietet die Möglichkeit, Vorlagen für Versuchsverläufe anzulegen, damit Sie die Bezeichnungen und Typen Ihrer Datenfelder nicht jedes Mal neu eingeben müssen. Dieses Kapitel wird demnach mit der Erstellung einer Vorlage beginnen. Klicken Sie dazu im Hauptfenster bitte auf den Menüeintrag „Optionen“ und danach auf „Vorlagen für Versuchsverläufe“. Das folgende Fenster erscheint:



Klicken Sie auf den Knopf „Neu“, um eine neue Vorlage zu erstellen. Geben Sie dann in das Feld „Name der Vorlage“ einen, wenn möglich eindeutigen, Namen ein. Falls Ihr Administrator die entsprechende Funktion aktiviert hat, können Sie Ihre Vorlage auch als öffentlich markieren, damit sie allen ensochemLab Benutzern zur Verfügung steht. In diesem Fall muss der Name zwingend eindeutig sein.

Um Spalten in Ihre Vorlage aufzunehmen, klicken Sie bitte auf den Knopf „Neue Spalte“. Sie können dann im Feld „Spaltenname“ einen Bezeichner für das Feld angeben. Die Auswahlbox Typ ermöglicht es Ihnen, den Datentyp Ihres Feldes zu ändern. Mögliche Typen sind:

Datentyp	Erklärung
Text	Ein Textfeld kann jeden beliebigen Wert annehmen. Buchstaben, Zahlen und Sonderzeichen sind möglich.
Ganzzahliger Wert	Dieser Feldtyp unterstützt nur ganze Zahlen. Es können keine anderen Zeichen eingegeben werden.
Fließkommawert	Dieser Feldtyp unterstützt nur Dezimalzahlen. Es können keine anderen Zeichen eingegeben werden.
Datum	Dieser Feldtyp ermöglicht die Eingabe eines Datums
Zeit	Dieser Feldtyp ermöglicht die Eingabe eines Zeitpunkts oder einer Zeitspanne.
Logischer Wert	Dieser Feldtyp entspricht einem logischen „Ja / Nein“ Feld.
Mehrzeiliger Text	Dieser Feldtyp entspricht einem beliebig langen Text, der sich im Gegensatz zum normalen Textfeld auch über mehrere Zeilen erstrecken kann.
Formatierter Text	Dieser Feldtyp entspricht einem mehrzeiligem Text, der zuätzlich Formatierungen wie Schriftart, Schriftgröße, Fett, Kursiv, Unterstrichen und Farbe erlaubt.

Das Definieren eigener Datentypen ist leider nicht möglich.

Außerdem können Sie bestimmen, in welche Richtung die Daten in der Anzeige ausgerichtet werden sollen. Möglich ist linksbündig, zentriert und rechtsbündig.

Der Datentyp und die Ausrichtung gelten immer für die gesamte Spalte. Es ist nicht möglich, für einzelne Zeilen andere Einstellungen zu verwenden. Eine Zeile kann lediglich durchgängig als Kommentarzeile markiert werden (siehe weiter unten).

Die Reihenfolge der Spalten verändern Sie dadurch, dass Sie eine Spalte auswählen und sie dann mit Hilfe der Pfeiltasten entweder nach oben oder nach unten schieben.

Mit dem „Löschen“ Knopf können Sie eine bestehende Spalte aus der Vorlage löschen.

Wenn Ihr Administrator die entsprechende Funktion aktiviert hat, können Sie entscheiden, ob Sie Ihre Vorlage als öffentlich markieren und sie somit anderen Benutzern zur Verfügung stellen möchten. Kreuzen Sie in diesem Fall einfach das Auswahlfeld „Öffentlich“ an. Andere Benutzer können Ihre Vorlage jedoch nur verwenden, nicht aber löschen oder bearbeiten.

Bereits bestehende Vorlagen sehen Sie in den beiden Listen auf der linken Seite des Dialogs. Die obere Liste enthält Ihre eigenen Vorlagen (gleichermaßen Öffentliche und Private). Die untere Liste enthält alle öffentlichen Vorlagen anderer Benutzer.

Sie können Ihre Vorlage auch damit beginnen, dass Sie eine bestehende Vorlage kopieren. Wählen Sie diese dazu einfach aus einer der Listen aus und klicken Sie auf „Kopieren“.

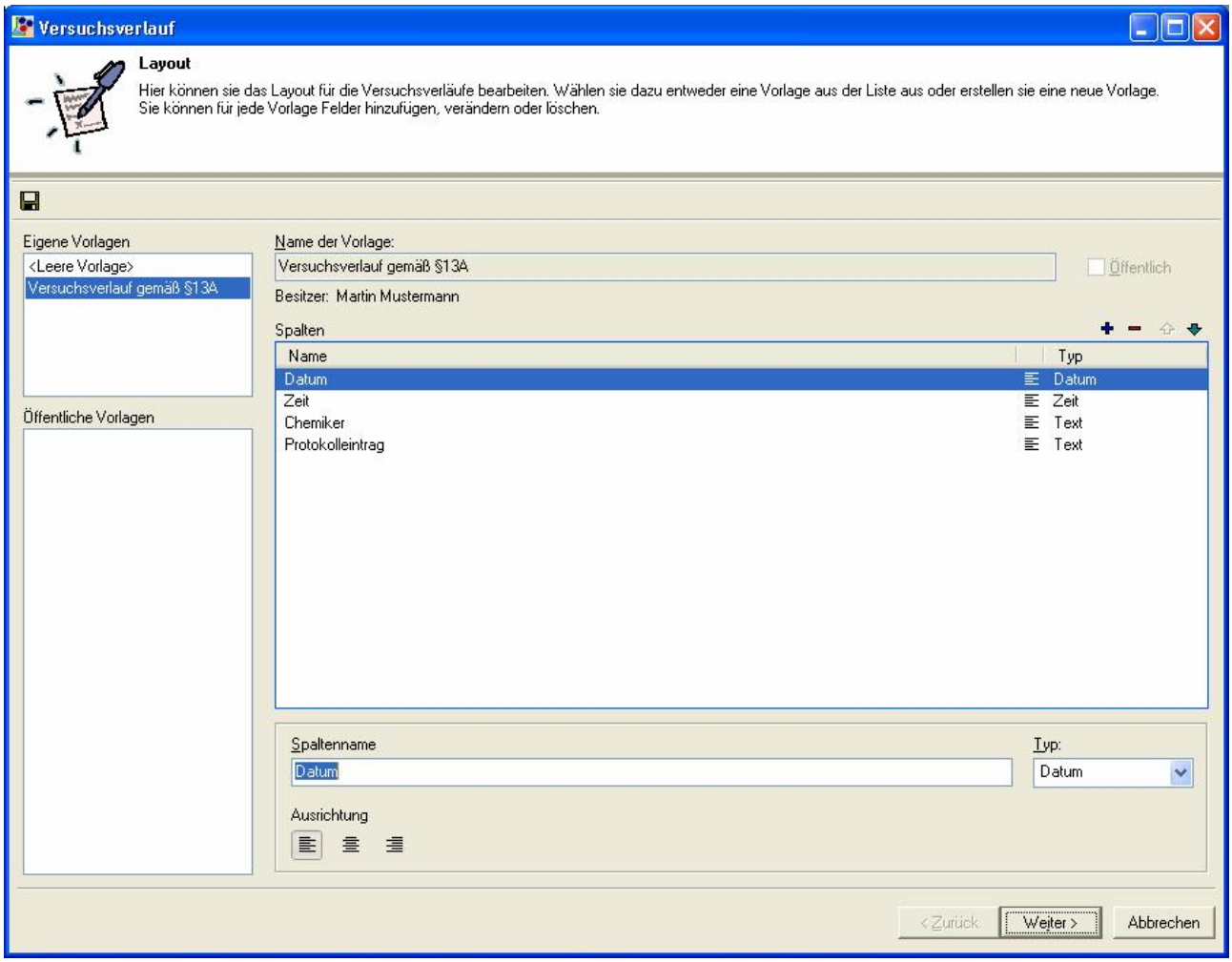
Wie bereits weiter oben angesprochen, steht Ihnen der „Löschen“ Kopf zum Entfernen einer Vorlage nur für eigene Vorlagen zur Verfügung. Diese Einschränkung betrifft auch Administratoren.

Generell kann eine Vorlage beliebig viele Spalten enthalten. ensochemLab enthält hierbei keine Beschränkungen.

Wählen Sie als Name der Vorlage „Versuchsverlauf gemäß 13 A“ und definieren Sie folgende Spalten:

Name	**Typ**
Datum	Datum
Uhrzeit	Zeit
Chemiker	Text
Protokolleintrag	Text

Nachdem Sie nun über eine Vorlage für einen Versuchsverlauf verfügen, können wir uns nun dem Versuchsverlauf selbst zuwenden. Schließen Sie dazu bitte zuerst den Dialog mit „OK“, um Ihre Daten zu speichern. Wählen Sie nun im Hauptmenü das Experiment aus, zu dem Sie einen Versuchsverlauf eingeben möchten und klicken Sie dann auf den Knopf „Versuchsverlauf bearbeiten“ in der Symbolleiste. Der folgende Assistent erscheint:



Dieser Dialog dient zur Auswahl einer Vorlage für den Versuchsverlauf. Wenn Sie einen bereits bestehenden Versuchsverlauf bearbeiten, finden Sie in der linken oberen Liste zusätzlich den Eintrag <Bestehende Vorlage>, der Ihren aktuellen Daten entspricht, unabhängig davon, ob die Vorlage in der Zwischenzeit verändert wurde.

An dieser Stelle besteht erneut die Möglichkeit, weitere Vorlagen zu erstellen. Um eine vollständig neue Vorlage anzulegen, wählen Sie auf der linken Seite in der oberen Liste bitte den Eintrag <leere Vorlage> aus. Geben Sie dann wie weiter oben beschrieben die Detaildaten zur Ihrer neuen Vorlage ein und klicken Sie auf den „Speichern“ Knopf.

Bestehende Vorlagen können in diesem Assistenten nicht verändert werden. Verwenden Sie hierfür den gerade besprochenen gesonderten Verwaltungsdialog. Sie können jedoch einen bestehenden Datensatz als Ausgangsbasis für neue, abweichende Vorlagen verwenden, indem Sie eine bestehende Vorlage auswählen, die gewünschten Änderungen vornehmen, und dann ebenfalls auf „Speichern“ klicken. Geben Sie dann bitte den Namen für die neue Vorlage ein und entscheiden Sie, ob Sie die Vorlage als öffentlich markieren möchten. Dabei gelten die gleichen Anmerkungen wie beim Erstellen von Vorlagen über den gesonderten Administrationsdialog. Klicken Sie danach auf „OK“. Klicken Sie auf „Abbrechen“, um die Vorlage nicht zu speichern und zum Assistenten zurückzukehren.

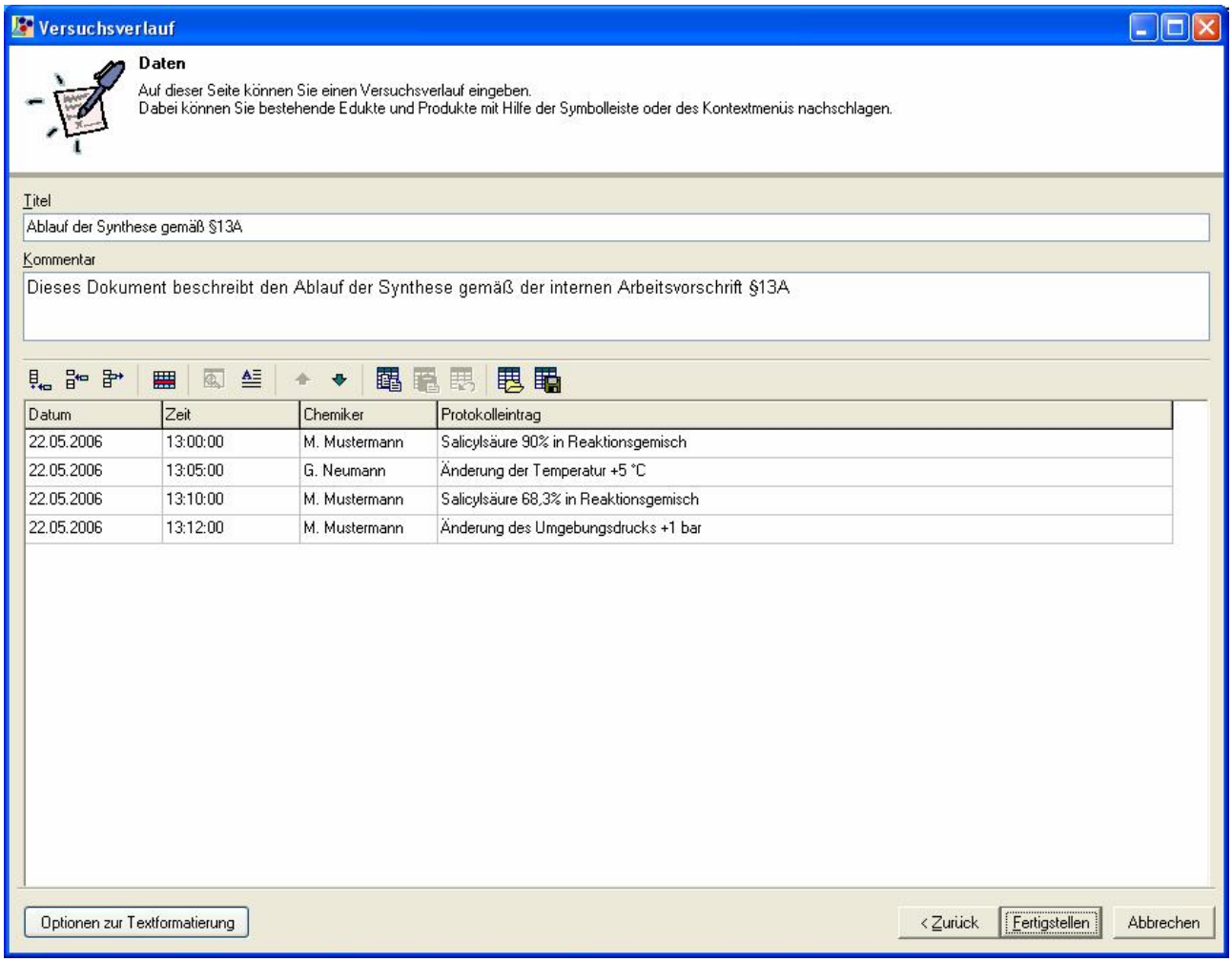
Sie können auch eine temporäre Vorlage nur für diese Versuchsbeschreibung verwenden, indem Sie Ihre Auswahl einfach nicht speichern.

Da wir in diesem Beispiel bereits eine Vorlage erstellt haben, wählen Sie diese bitte aus und klicken Sie auf „Weiter“ im Assistenten.

Sie gelangen nun zur eigentlichen Eingabeseite, auf der Sie sowohl allgemeine Daten wie Titel und Kommentar, als auch die Daten Ihrer soeben definierten Felder eintragen können. Die Kommentardaten können analog der Möglichkeiten für formatierten Text mit zusätzlichen Textattributen versehen werden. Dabei können Sie beliebig viele Datenzeilen anlegen. Beim Speichern werden jedoch nur die Zeilen übernommen, bei denen mindestens ein Datenfeld Einträge enthält. Alle vollständig leeren Datenzeilen werden verworfen.

Das folgende Beispiel verwendet die in einem der voran gegangenen Bildschirmfotos erstellte Struktur aus den folgenden Feldern:

Datenfeld	Datentyp
Datum	Datum
Uhrzeit	Zeit
Chemiker	Text
Protokolleintrag	Mehrzeiliger Text



Standardmäßig enthält die Tabelle bereits einen leeren Eintrag für die erste Zeile. Dieser Eintrag kann auch nicht vollständig gelöscht werden, er wird in diesem Fall sofort wieder als Leereintrag angelegt.

Um Daten in ein Datenfeld einzugeben, klicken Sie bitte mit der Maus hinein oder selektieren das Feld und drücken dann <Eingabe>. ensochemLab erlaubt jeweils nur die Eingabe von dem Datentyp entsprechenden Zeichen. Sie sind daher an die im vorherigen Schritt festgelegte Definition gebunden.

Bei der Eingabe können Sie die wichtigsten Edukt- und Produktdaten des Experiments nachschlagen und automatisch in ein Datenfeld eintragen lassen. Wählen Sie dazu bitte zuerst das gewünschte Feld aus und klicken Sie danach auf den Knopf „Edukt-/Produktdaten nachschlagen“ ensochemLab klappt nun ein Auswahlmenü auf, in dem Sie zwischen Edukten und Produkten wählen können. Als jeweils nächste Ebene finden Sie die Namen der Substanzen und darunter wiederum deren Datenfelder. Natürlich können Sie auch direkt mit der rechten Maustaste auf eine Zelle klicken und einen Datenwert aus dem Kontextmenü einfügen.

Außerdem können Sie auch automatisch das aktuelle Datum oder die aktuelle Uhrzeit eintragen lassen. Diese Werte finden sich in der Kategorie „Vordefinierter Wert“.

Bitte beachten Sie, dass unabhängig von der Kategorie nur Daten eingefügt werden können, die dem Datentyp des aktuellen Feldes entsprechen. Die einzige Ausnahme hiervon bilden Textfelder, die alle Daten fassen können.

Zur besseren Übersichtlichkeit können Sie an Stelle der Ausklappliste oder des Kontextmenüs auch das bereits aus dem Kapitel „Erstellen Sie Ihr erstes Experiment“ bekannte Textbausteinfenster verwenden. Sie öffnen es mit einem Klick auf „Textbausteinfenster anzeigen / verbergen“. Trotz seines Namens bietet es aber nur die genannten Werte, nicht jedoch Textbausteine an.

Wenn Sie Daten im Kommentar verändern oder in entsprechenden Zellen, können Sie die Textattribute mit Hilfe eines speziellen Fensters zuweisen. Mit einem Klick auf „Optionen zur Textformatierung" wird diese Schaltfläche ein-, bzw. ausgeblendet.

Um eine weitere Zeile anzufügen, klicken Sie bitte auf den Knopf „Zeile hinzufügen“. Die neue Datenzeile wird dabei an das Ende der Tabelle angehängt. Um eine Zeile direkt vor der aktuellen Zeile einzufügen, klicken Sie bitte stattdessen auf den Knopf „Zeile einfügen“. Mit dem Knopf „Zeile löschen“ können Sie eine bestehende Datenzeile entfernen.

In einer Versuchsbeschreibung gibt es zwei Arten von Zeilen: Bisher haben wir lediglich mit Datenzeilen gearbeitet. Eine Datenzeile ist anhand der von Ihnen definierten Felder strukturiert. Außerdem gibt es noch Kommentarzeilen. Diese ermöglichen es Ihnen, unabhängig von der Felddefinition einen Kommentar als Freitext einzugeben. Zwischen den beiden Modi können Sie mit dem Knopf „Gesamte Zeile für Kommentar verwenden“ wechseln.

Beim Versuchsverlauf stehen Ihnen die gleichen Funktionen für den Datenaustausch mit Excel zur Verfügung wie bei tabellarischen Beschreibung, die Sie im Experimentassistenten eingegeben haben. Mit „Kopieren“ kopieren Sie den Inhalt Ihrer gesamten Tabelle in die Zwischenablage. Ein Klick auf „Einfügen“ fügt die geänderten Daten dann wieder in ensochemLab ein. Sollte Ihnen dabei ein Fehler unterlaufen sein, so können Sie die letzte Einfügeoperation mit einem Klick auf „Rückgängig“ wieder rückgängig machen.

Wenn Ihre Tabelle Kommentarzeilen enthält, werden diese beim Kopieren in die Zwischenablage mit dem Präfix „$$cmt$$“ versehen. Dieses ist für eine etwaige automatische Weiterverarbeitung der Daten im Zielprogramm vorgesehen. Diese Information wird auch benötigt, um die Daten später wieder in ensochemLab einlesen zu können.

In diesem Dialog stehen Ihnen genau wie bei der tabellarischen Durchführungsbeschreibung im Eingabeassistenten Funktionen für den Export nach und den Import von CSV zur Verfügung. Weiter Informationen zu diesem Thema finden Sie im gesonderten Kapitel „Datenaustausch mit CSV“.

Um Datum / Zeit Angaben, die z.B. aus einer als Kopie verwendeten Vorlage stammen, an die aktuellen Werte anzupassen können Sie im Kontextmenu nach Anwahl eines Datums- oder Zeitfeldes einen Hilfsassistenten starten (Datum / Zeit anpassen…). Mit diesem wird anhand eines neu festgelegten Referenzdatums, bzw. einer angegebenen Zeit der Verlauf neu berechnet.

Wenn Sie bereits über einen Versuchsverlauf verfügen, wechselt ensochemLab direkt zur Eingabeseite, sobald Sie diesen Assistenten öffnen.

Um den Assistenten zu verlassen und Ihre Daten in das Experiment zu übernehmen, klicken Sie bitte auf „Fertigstellen“.

Um einen bestehenden Versuchsverlauf aus einem Experiment zu löschen, zeigen Sie es einfach in einer Ansicht Ihrer Wahl an und klicken danach im Hauptmenü unter „Experiment“ auf „Versuchsverlauf löschen“

Bitte beachten Sie dabei jedoch, dass Ihr Versuchsverlauf unwiderruflich entfernt wird. Die einzige Möglichkeit der Wiederherstellung besteht darin, mit dem optional erhältlichen Modul der Versionsverwaltung eine ältere Version des Experiments zu reaktivieren.

Zusammenfassung:	Sie können optional den Versuchsverlauf eines Experiments dokumentieren. Vorlagen helfen dabei, regelmäßig verwendete Tabellenstrukturen wieder zu verwenden. Es können unternehmensweite Dokumentationsrichtlinien als öffentliche Vorlagen für alle Benutzer gespeichert werden.

8. Anzeigelayouts verwalten

Nachdem Sie im Kapitel über das Hauptmenü die verschiedenen Ansichtsmodi und Einstellmöglichkeiten für die Experimentanzeige kennen gelernt und sich eventuell auch bereits eine erste Arbeitsumgebung erstellt haben, soll dieses Kapitel nun näher darauf eingehen, wie Sie solche Layouts speichern und nebeneinander verwenden können. Dies ermöglicht Ihnen, auf einmal erstellte Vorlagen zurückgreifen zu können, ohne diese bei wechselnden Anforderungen immer neu erstellen zu müssen.

Die bisherige Arbeitsweise entspricht dem Standardlayout: Es wird bei jedem Start von ensochemLab geladen und beim Beenden mit den aktuellen Änderungen wieder gespeichert, um Ihre jeweils letzte Oberfläche zu erhalten. Daneben können Sie die gerade gewählten Anzeigeeinstellungen auch gesondert abspeichern, indem Sie im Hauptmenü unter „Optionen | Anzeigelayouts“ auf „Aktuelles Layout speichern“ klicken.

Es erscheint ein Fenster, in dem Sie einen Name, eine Beschreibung und einen Speichermodus für das Layout angeben können. Der Speichermodus bestimmt dabei, wie ensochemLab das Layout speichern soll:

- **Verändertes Layout aktualisieren**
  Die aktuellen Einstellungen überschreiben das zuletzt geladene Layout. Es sind daher keine weiteren Angaben nötig. Diese Option ist nicht verfügbar, wenn das Standardlayout aktiv ist und kann nur verwendet werden, wenn das aktuelle Layout verändert wurde.

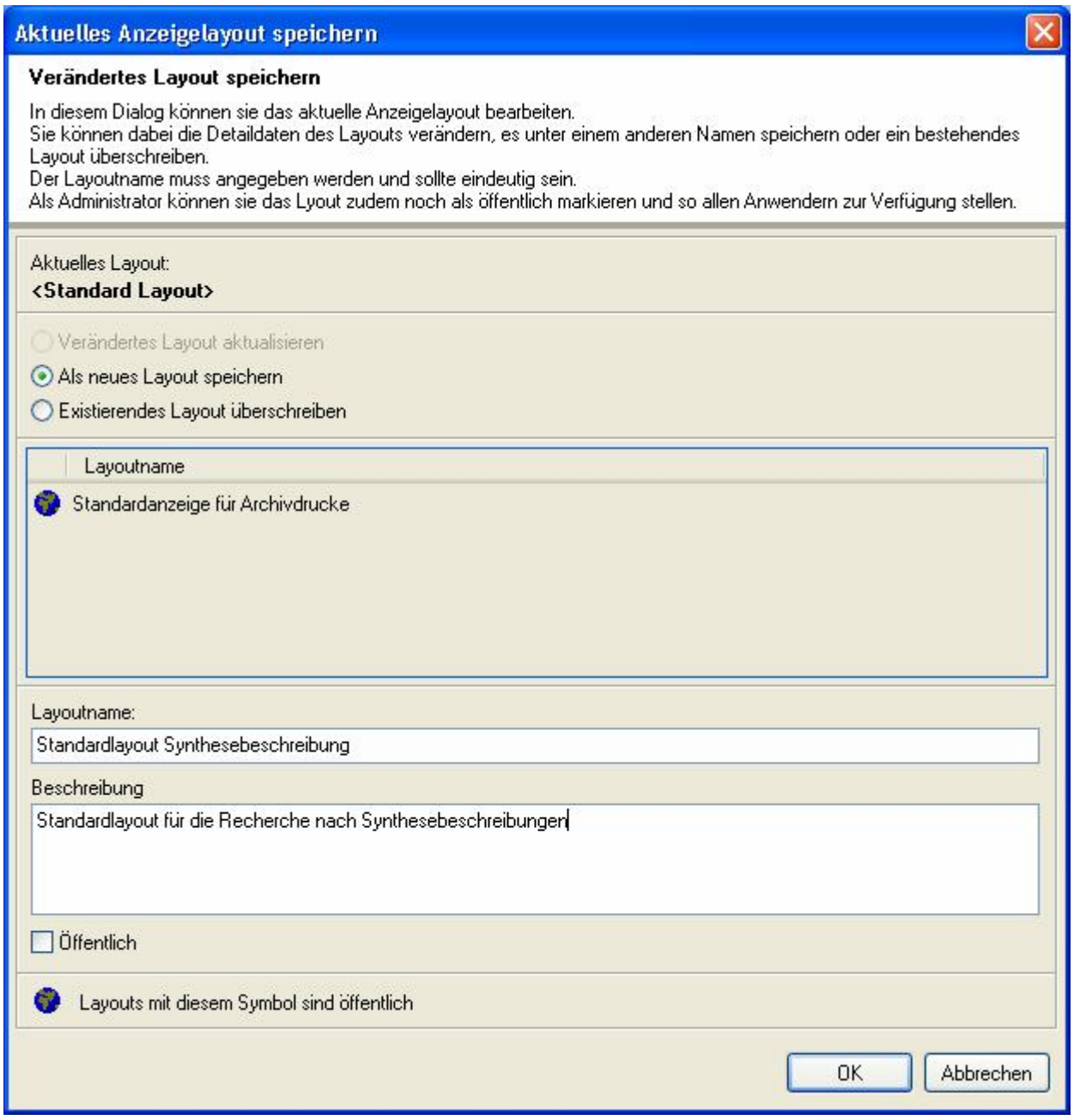
- **Als neues Layout speichern**
  Diese Funktion speichert die aktive Ansicht unter einem neuen Namen. Doppelte Namen sind für private Layouts zwar theoretisch möglich, stellen jedoch unterschiedliche Datensätze dar und können im somit praktischen Einsatz oft verwirrend sein. Für öffentliche Layouts muss der Name zwingend eindeutig sein.
  Es muss immer ein Name angegeben werden. Diese Option ist immer verfügbar.

- **Existierendes Layout überschreiben**
  Hiermit überschreiben Sie ein beliebiges existierendes Anzeigelayout. Wählen Sie dazu ein Layout aus der Liste aus und ändern Sie dann, falls gewünscht, die Beschreibungsdaten. Diese Option ist nur verfügbar, wenn bereits mindestens ein Layout in der Datenbank existiert.
  Selbstverständlich können Sie dabei immer nur eigene Layouts ersetzen.

Der Name des aktuell verwendeten Layouts wird im oberen Fensterbereich angezeigt. Am unteren Rand des Dialogs können Sie auswählen, ob das neue bzw. geänderte Layout öffentlich sein soll. Mit dieser Funktion können Sie es anderen ensochemLab Benutzern zur Verfügung stellen. Diese können es aber nur lesend verwenden, d.h. keine Änderungen daran vornehmen und es auch nicht löschen.

Bitte beachten Sie jedoch, dass standardmäßig nur Administratoren öffentliche Layouts anlegen können. Diese Funktion kann aber optional auch für normale Benutzer frei geschaltet werden.

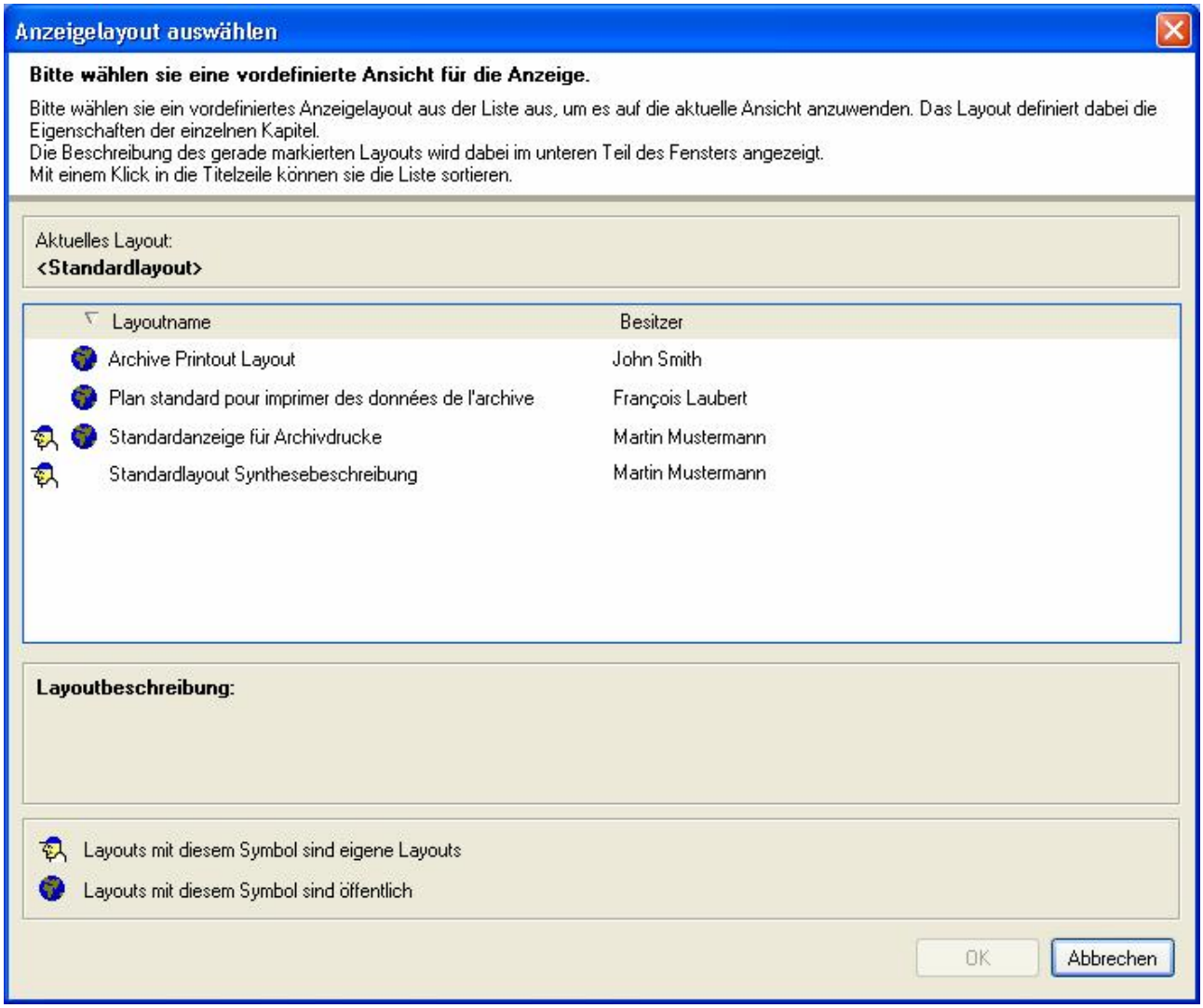
Ein Layout kann also wie folgt definiert werden:


Aktuelles Anzeigelayout speichern
Verändertes Layout speichern
In diesem Dialog können sie das aktuelle Anzeigelayout bearbeiten.
Sie können dabei die Detaildaten des Layouts verändern, es unter einem anderen Namen speichern oder ein bestehendes Layout überschreiben.
Der Layoutname muss angegeben werden und sollte eindeutig sein.
Als Administrator können sie das Lyout zudem noch als öffentlich markieren und so allen Anwendern zur Verfügung stellen.
Aktuelles Layout:
<Standard Layout>
Verändertes Layout aktualisieren
Als neues Layout speichern
Existierendes Layout überschreiben
Layoutname
Standardanzeige für Archivdrucke
Layoutname:
Standardlayout Synthesebeschreibung
Beschreibung
Standardlayout für die Recherche nach Synthesebeschreibungen
Öffentlich
Layouts mit diesem Symbol sind öffentlich
OK
Abbrechen

Klicken Sie auf „OK“, um die ausgewählten Änderungen durchzuführen oder auf „Abbrechen“, um den Vorgang nicht in die Datenbank zu übernehmen.

Die Layouts werden auch auf Ausdrucke angewendet. Dies ermöglicht Ihnen, spezielle Drucklayouts zum Beispiel für Archivierung, Einreichung beim Patentamt, usw. anzulegen, die Sie im Bedarfsfall nur noch aktivieren müssen.

Um ein Layout zu aktivieren (anzuwenden), klicken Sie in der Symbolleiste des Hauptfensters bitte auf „Vordefiniertes Layout für Anzeige auswählen“. Es erscheint ein Auswahldialog, in dem Sie sowohl Ihre eigenen als auch die öffentlichen Layouts Ihrer Mitbenutzer selektieren können. Zu jedem Layout wird der Name und der Typ (eigen, öffentlich) in einer Tabelle angezeigt:


Anzeigelayout auswählen
Bitte wählen sie eine vordefinierte Ansicht für die Anzeige.
Bitte wählen sie ein vordefiniertes Anzeigelayout aus der Liste aus, um es auf die aktuelle Ansicht anzuwenden. Das Layout definiert dabei die Eigenschaften der einzelnen Kapitel.
Die Beschreibung des gerade markierten Layouts wird dabei im unteren Teil des Fensters angezeigt.
Mit einem Klick in die Titelzeile können sie die Liste sortieren.
Aktuelles Layout:
<Standardlayout>
Layoutname
Besitzer
Archive Printout Layout
John Smith
Plan standard pour imprimer des données de l'archive
François Laubert
Standardanzeige für Archivdrucke
Martin Mustermann
Standardlayout Synthesebeschreibung
Martin Mustermann
Layoutbeschreibung:
Layouts mit diesem Symbol sind eigene Layouts
Layouts mit diesem Symbol sind öffentlich
OK
Abbrechen

Sollten Sie Fragen zu oder Änderungswünsche an einem Layout haben, so können Sie sich an den angegebenen Besitzer wenden.

Sobald Sie einen Eintrag auswählen, erscheint im unteren Teil des Dialogs seine Beschreibung. Bitte beachten Sie, dass das gerade aktive Layout nicht in der Auflistung enthalten ist. Sie können auch mit dem bereits weiter oben besprochenen Standardlayout zu den Einstellungen Ihrer letzten ensochemLab Sitzung zurückkehren.

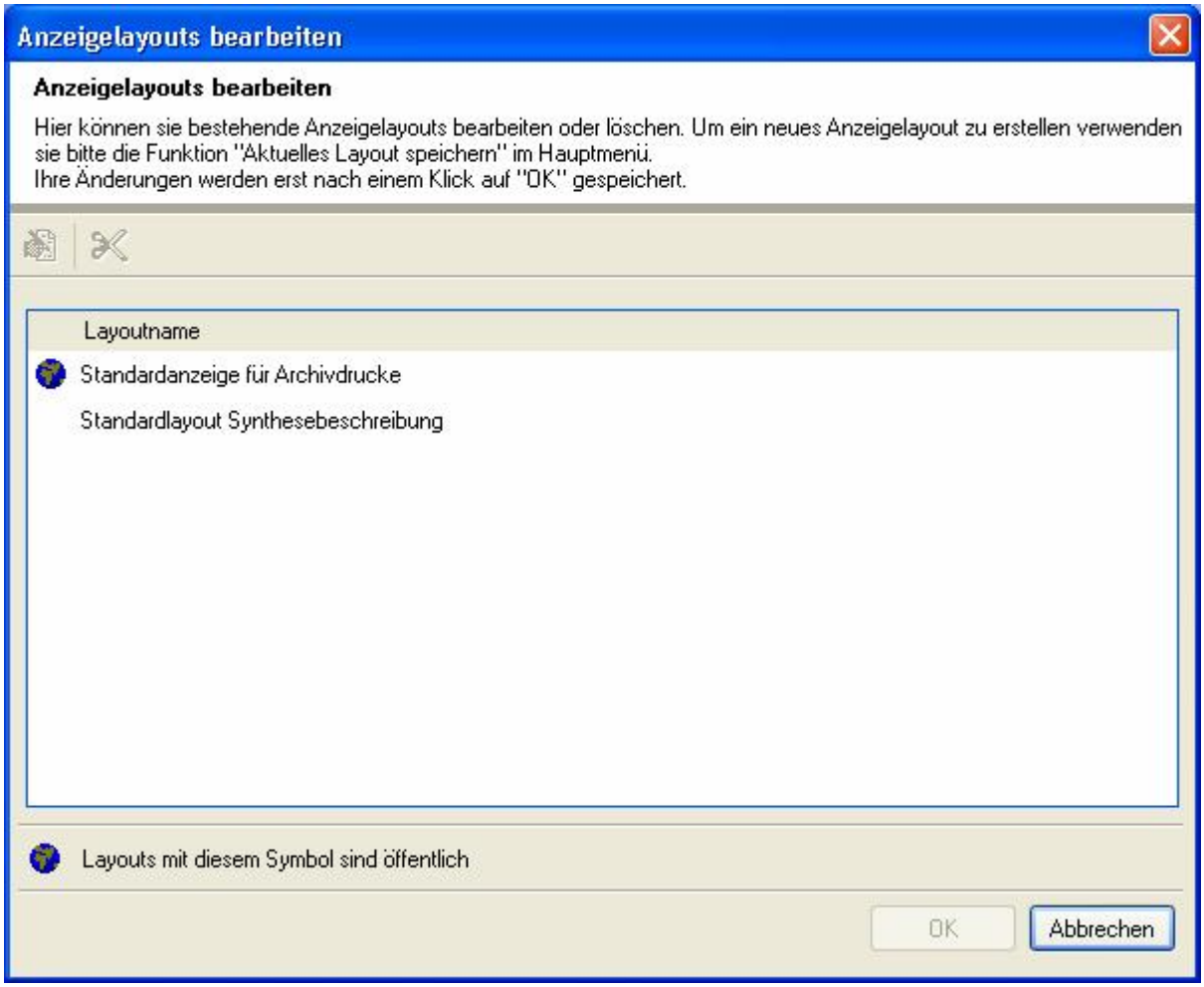
Nachdem Sie Ihre Auswahl getroffen haben klicken Sie bitte auf „OK“. Der „Abbrechen“ Knopf schließt den Dialog und behält Ihre aktuellen Einstellungen bei.
Wenn Sie ensochemLab mit einem geladenen Layout bearbeiten, wird das vordefinierte Standardlayout gemäß der vorigen Definition damit überschrieben. Sie sollten diesen „Datensatz“ daher auf keinen Fall zur Speicherung von Anzeigeeinstellungen verwenden.

Sie können beliebig viele Layouts speichern, es kann aber immer nur ein Layout aktiv sein.

Sie können Anzeigelayouts selbstverständlich auch löschen bzw. ihre Beschreibungsdaten ändern. Hierfür dient ein gesonderter Bearbeitungsdialog, den Sie über das Hauptmenü unter „Optionen | Anzeigelayouts | Anzeigelayouts bearbeiten“ starten können.

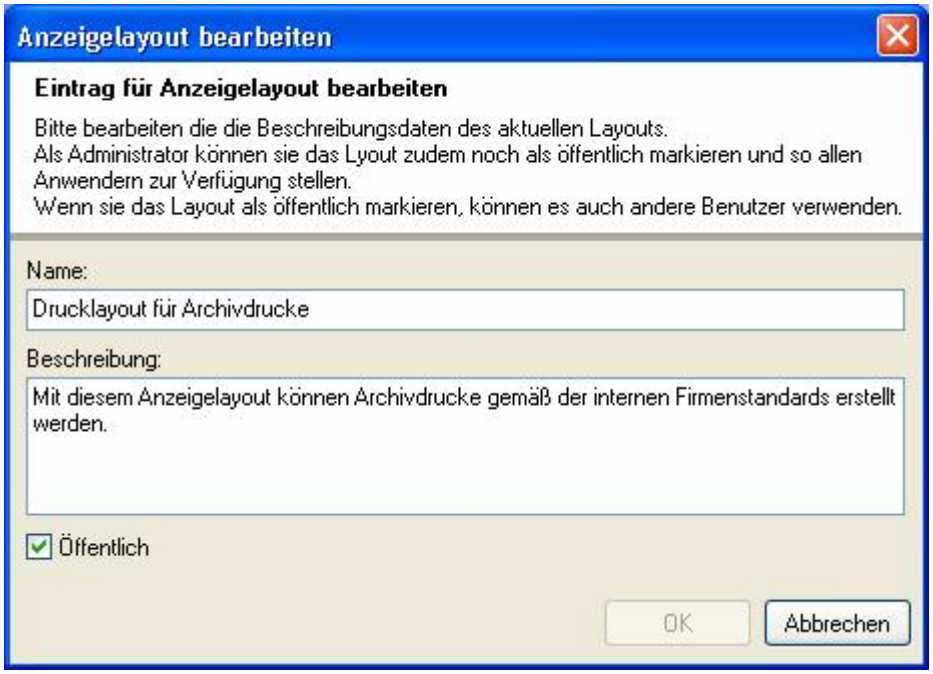
Der nun erscheinende Dialog zeigt lediglich alle eigenen Layouts, da Sie auch nur diese bearbeiten können.

Diese Einschränkung gilt auch für Administratoren. Um die öffentlichen oder privaten Anzeigelayouts anderer Benutzer zu löschen, verwenden Sie bitte die entsprechenden Funktionen im Administrationsdialog „Benutzerobjekte verwalten“. Dieser wird im Administrationshandbuch eingehend beschrieben.


Anzeigelayouts bearbeiten
Anzeigelayouts bearbeiten
Hier können sie bestehende Anzeigelayouts bearbeiten oder löschen. Um ein neues Anzeigelayout zu erstellen verwenden sie bitte die Funktion "Aktuelles Layout speichern" im Hauptmenü.
Ihre Änderungen werden erst nach einem Klick auf "OK" gespeichert.
Layoutname
Standardanzeige für Archivdrucke
Standardlayout Synthesebeschreibung
Layouts mit diesem Symbol sind öffentlich
OK
Abbrechen

Die Liste zeigt den Namen des Layouts und gibt mit der Weltkugel an, ob es sich um einen öffentlichen Datensatz handelt.

Um einen Datensatz zu bearbeiten, wählen Sie ihn bitte aus der Liste aus und klicken Sie dann auf „Eigenschaften des Layouts bearbeiten“:


Anzeigelayout bearbeiten
Eintrag für Anzeigelayout bearbeiten
Bitte bearbeiten die die Beschreibungsdaten des aktuellen Layouts.
Als Administrator können sie das Lyout zudem noch als öffentlich markieren und so allen Anwendern zur Verfügung stellen.
Wenn sie das Layout als öffentlich markieren, können es auch andere Benutzer verwenden.
Name:
Drucklayout für Archivdrucke
Beschreibung:
Mit diesem Anzeigelayout können Archivdrucke gemäß der internen Firmenstandards erstellt werden.
Öffentlich
OK
Abbrechen

Sie können nun die Beschreibungsdaten ändern, nicht aber den Inhalt wie sichtbare Kapitel, Spaltenbreiten, etc. Dazu müssen Sie das Layout wie weiter oben beschrieben laden, die gewünschten Änderungen in der Experimentanzeige vornehmen, im Hauptmenü unter „Optionen | Anzeigelayouts | Aktuelles Layout speichern“ klicken, im angezeigten Dialog „Verändertes Layout speichern“ wählen und auf „OK“ klicken.

Sie können ein Layout hier aber nachträglich als öffentlich markieren, bzw. diese Option wieder entfernen (nur Administratoren).

Mit „OK“ übernehmen Sie Ihre Änderungen. Um ohne Änderungen zum vorigen Dialog zurückzukehren, klicken Sie bitte auf „Abbrechen“.

Um ein Layout zu löschen, klicken Sie im Übersichtsdialog (siehe vorherige Seite) bitte auf „Ausgewähltes Layout löschen“.

Bitte beachten Sie, dass Ihre Änderungen erst in die Datenbank übernommen werden, wenn Sie diesen Dialog mit „OK“ verlassen. Mit einem Klick auf „Abbrechen“ können Sie alle in diesem Modus gemachten Änderungen rückgängig machen.

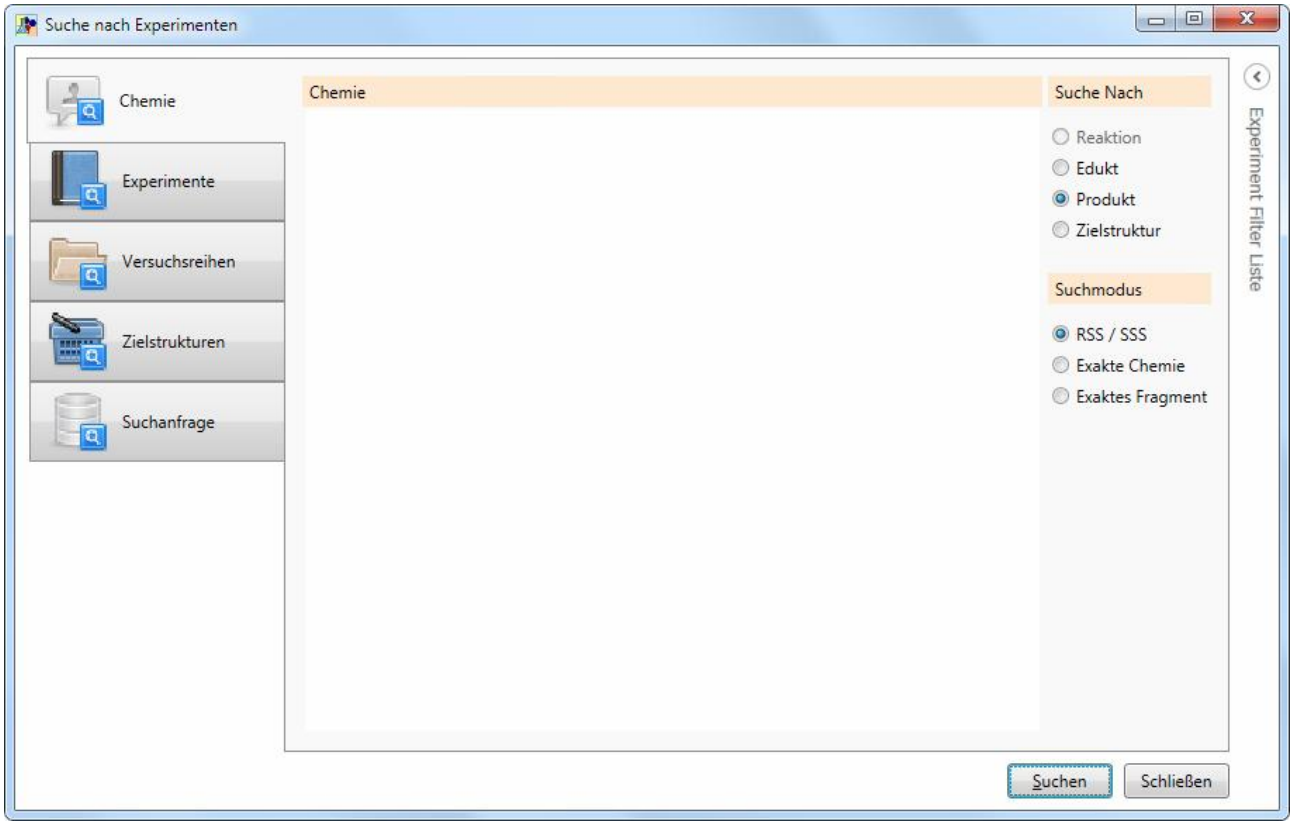
Zusammenfassung:	Anzeigelayouts ermöglichen das Speichern Ihrer persönlichen Anzeigeeinstellungen in der Experimentansicht. Mit mehreren Layouts können Sie flexibel abhängig von Ihrer jeweiligen Arbeitsaufgabe die am besten geeignete Sicht benutzen, ohne sie ständig neu erstellen zu müssen.

9. Suchfunktionen

ensochemLab bietet mehrere Wege für die Suche nach Experimenten. Sie finden sie im Hauptmenü unter „Suchen“.

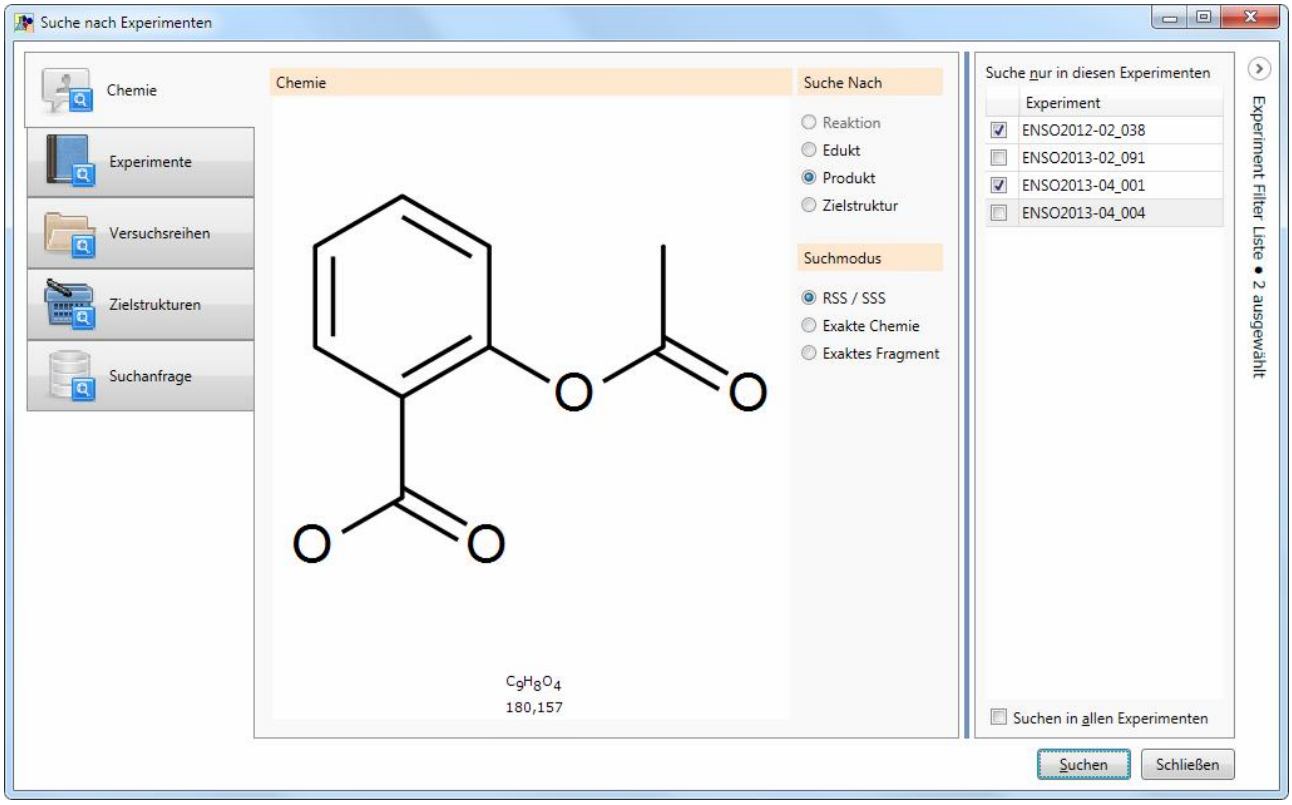
Dieses Kapitel befasst sich mit den einzelnen Suchoptionen und erklärt die Verwendung von Ergebnislisten. Im Folgenden werden alle verschiedenen Suchoperationen, die von ensochemLab unterstützt werden, einzeln vorgestellt.

Die beiden Suchfunktionen nach eigenen Experimenten werden direkt ausgeführt und die Ergebnisse automatisch in den Navigator übernommen. Alle weiteren Suchfunktionen werden in einem gemeinsamen Fenster auf verschiedenen Seiten angeboten. Sie können jederzeit eine andere Suche ausführen ohne das Fenster verlassen zu müssen.



Wenn eine Suche etwas länger dauert müssen Sie nicht darauf warten, dass sie beendet wird. Sie können jederzeit die Seite wechseln und dort andere Suchen durchführen oder mit Alt-Tab bzw. die Windows Taskleiste zu ensochemLab zurück wechseln und dort weiter arbeiten. Laufende Suchen werden durch ein kleines Zahnradsymbol auf dem zugehörigen Tab angezeigt.

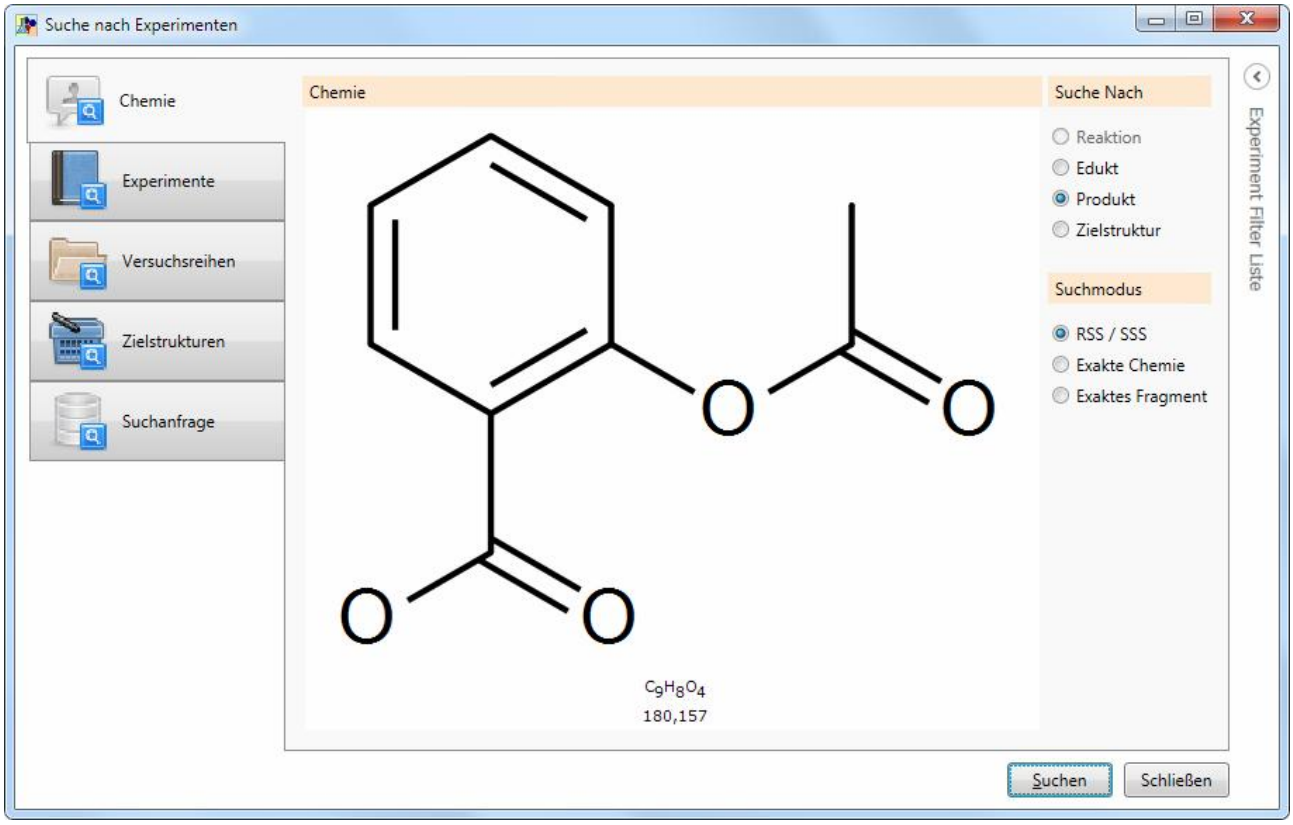
Beim Öffnen des Suchfensters gibt ensochemLab den Inhalt des aktuellen Ordners im Navigator mit. Über den kleinen Pfeil am rechten Rand können Sie diese Liste anzeigen und Experimente zur Filterung auswählen, d.h. eine Suche nur in diesen Experimenten durchführen.



Wenn das Fenster geöffnet wird ist „Suchen in allen Experimenten“ ausgewählt und die Suchen erfolgen in der gesamten Datenbank.

9.1. Chemie

Auf dieser Seite können Sie nach bestimmten Molekülen oder Reaktionen suchen.



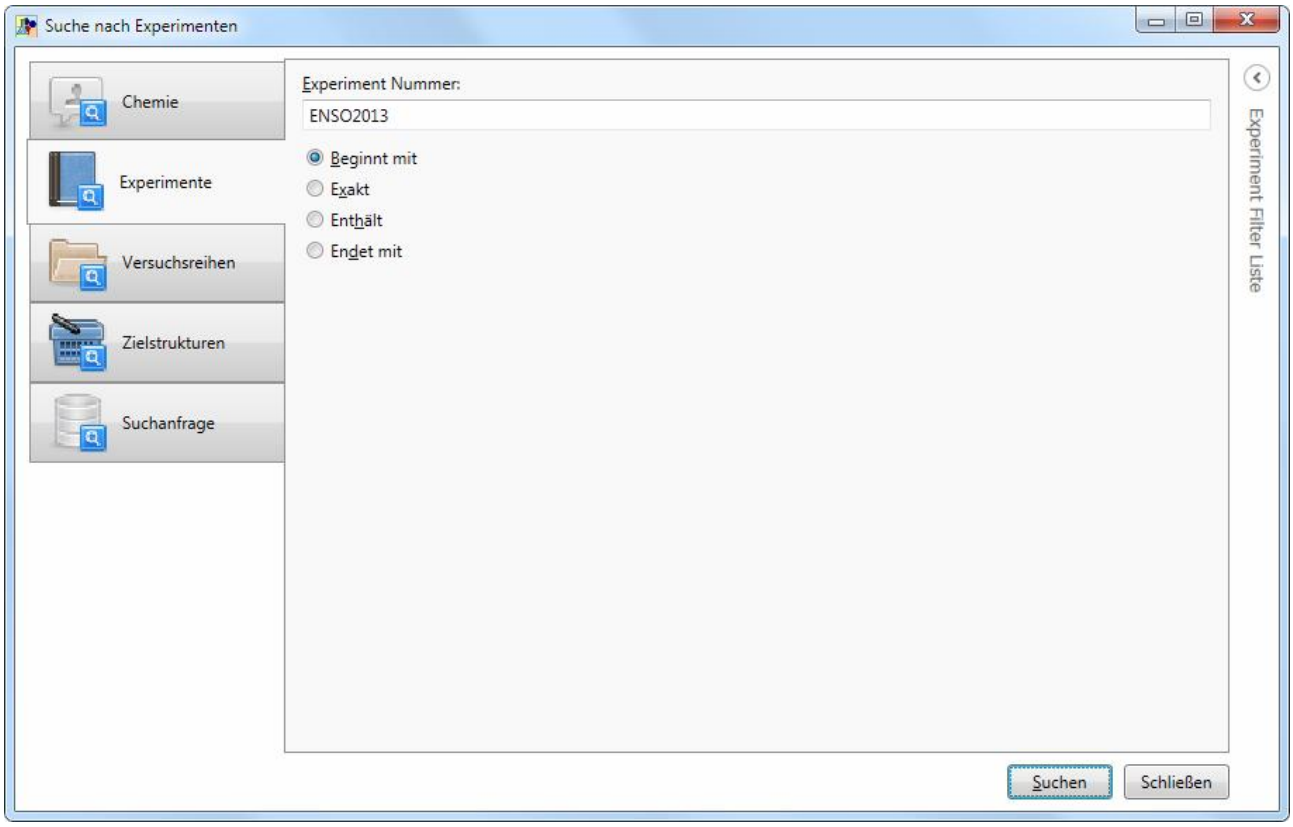
Über einen Doppelklick in das Strukturfeld bzw. über das Kontextmenü starten Sie den in Ihren Einstellungen ausgewählten Editor zur Eingabe eines Moleküls oder einer Reaktion. Im Kontextmenü stehen auch Befehle zum Einfügen aus der Zwischenablage oder zum Import einer Datei zur Verfügung.

Mit den beiden Auswahlfeldern auf der rechten Seite des Dialogs können Sie auswählen nach welchen Chemiedaten in welchem Modus gesucht werden soll. Gesucht werden kann nach Reaktionen, Edukten, Produkten und Zielmolekülen. Hierbei kann jeweils entweder eine exakte Suche oder Substruktur- bzw. Subreaktionssuche durchgeführt werden. Die „exakte Fragmentsuche“ führt einen exakten Vergleich der Suchstruktur mit den einzelnen Fragmenten eines Moleküls durch. Entspricht mindestens ein Fragment der Anfrage, handelt es sich um einen Treffer.

Nachdem Sie Ihre Auswahl getroffen haben, klicken Sie bitte auf „Suchen“.

9.2. Experimente

Wenn Sie ein oder mehrere Experimente anhand der Experimentnummer suchen möchten, wählen Sie diese Seite aus.



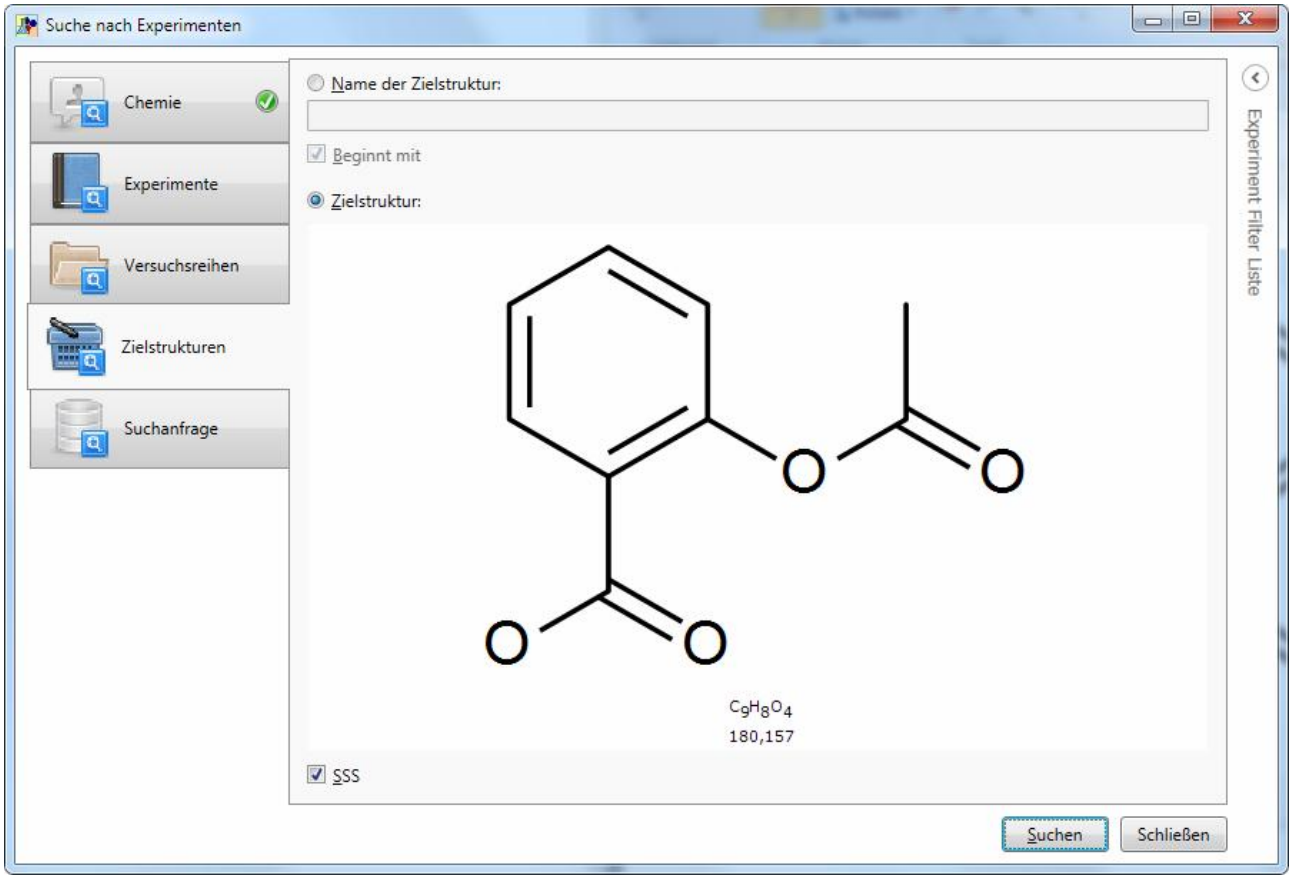
Über die Optionsfelder können Sie festlegen wie Ihre Eingabe in den Experimentnummern enthalten sein soll.

9.3. Versuchsreihen

Die Suche nach Versuchsreihen findet alle Experimente, bei denen das Feld „Versuchsreihe“ im Experimentkopf einen bestimmten Inhalt hat. Die Optionen entsprechen der Suche nach Experimentnummern.

9.4. Zielstrukturen

Zielstrukturen können Sie entweder über den Namen oder eine Struktursuche suchen.



Wählen Sie zuerst über die beiden Optionsfelder aus ob Sie nach Namen oder Struktur suchen möchten. Bei der Namenssuche können Sie angeben ob der Zielstrukturname mit Ihrer Eingabe beginnen oder vollständig übereinstimmen soll. Die Suche unterscheidet nicht zwischen Groß- und Kleinschreibung.

Bei der Chemiesuche steht eine exakte Suche oder, wenn „SSS“ angekreuzt ist, eine Substruktursuche zur Verfügung. Den in Ihren Einstellungen ausgewählten Chemieeditor starten Sie wie üblich entweder mit einem Doppelklick auf das Strukturfeld oder über das Kontextmenü des Strukturfelds.

9.5. Eigene Experimente

Diese Funktion sucht nach allen Experimenten, für die Sie verantwortlich sind. Dies bedeutet, dass alle Experimente gefunden werden, als deren Besitzer Sie eingetragen sind, egal ob Sie diese selbst erstellt oder von einem anderen Benutzer übernommen haben.

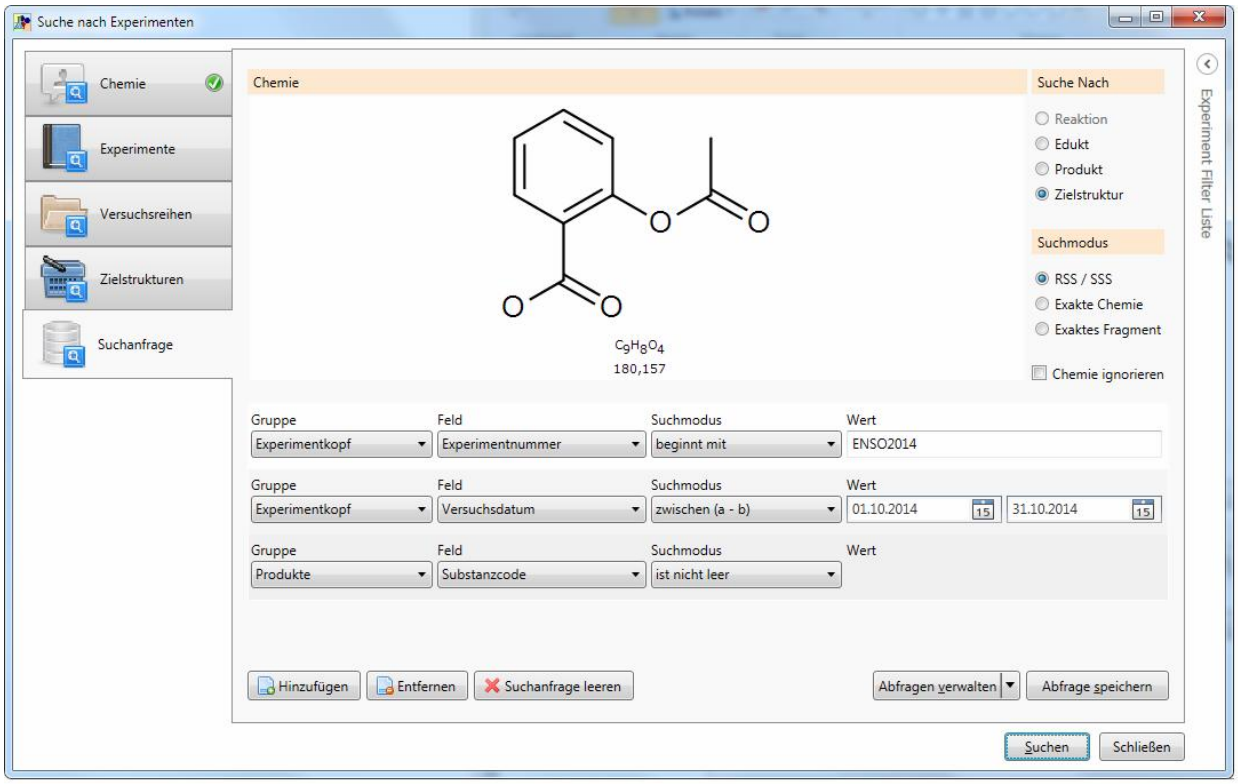
Diese Art der Suche wird automatisch ausgeführt, wenn Sie im Hauptmenü direkt auf den Suchknopf klicken.

9.6. Eigene Experimente mit Status in Arbeit

Dieser Suchmodus entspricht der Suche „Eigene Experimente“. Es werden jedoch nur eigene Experimente gefunden, die noch nicht abgeschlossen sind.

9.7. Suchanfrage

In der Suchanfrage können Sie beliebige Suchparameter einschließlich Strukturen bzw. Reaktionen miteinander kombinieren.



Die Chemiesuche entspricht der Seite „Chemie“. Wenn Sie bereits eingezeichnete Strukturen bzw. Reaktionen nicht in Ihre Suche einbeziehen möchten, wählen Sie als Suchmodus den untersten Eintrag „Chemie ignorieren“.

Im unteren Teil des Fensters können Sie eine Suche nach Daten in allen Kapiteln der Experimente zusammenstellen. Wählen Sie zuerst die Gruppe bzw. das Kapitel, dann das Feld in dem Sie suchen möchten, dann den Suchmodus und zuletzt, falls notwendig, die Zeichenfolge oder den Wert, nach dem Sie suchen möchten. Abhängig vom Feld, in dem Sie suchen möchten variieren die zur Verfügung stehenden Suchmodi sowie die Eingabemöglichkeiten für die Zeichenfolge bzw. Auswahl, nach der gesucht werden soll. Bei Textfeldern wird die Groß- und Kleinschreibung grundsätzlich nicht beachtet.

Die Suchmodi für Textfelder sind:

exakt gleich	Der eingegebene Suchtext muss exakt dem Text in der Datenbank entsprechen.
enthält	Der Text in der Datenbank muss den eingegebenen Suchtext an einer beliebigen Stelle enthalten. Davor und danach können weitere Zeichen stehen.
beginnt mit	Der Text in der Datenbank hat mit dem Suchtext zu beginnen. Danach kann eine beliebige Anzahl weiterer Zeichen folgen.
endet mit	Der Text in der Datenbank hat mit dem Suchtext zu enden. Davor kann eine beliebige Anzahl weiterer Zeichen stehen.
ist nicht leer	Das Datenbankfeld darf nicht leer sein.
ist leer	Das Datenbankfeld muss leer sein.

Die Suchmodi für Datumsfelder sind:

vor	Das Datum in der Datenbank muss zeitlich vor dem eingegebenen Suchdatum liegen
nach	Das Datum in der Datenbank muss zeitlich nach dem eingegebenen Suchdatum liegen
zwischen (a - b)	Das Datum in der Datenbank muss sich im angegebenen Suchzeitraum befinden

Die Suchmodi für numerische Felder sind:

gleich (=)	Der Wert in der Datenbank muss exakt mit dem eingegebenen Suchwert übereinstimmen
größer als (>)	Der Wert in der Datenbank muss größer als der eingegebene Suchwert sein
größer als oder gleich (> =)	Der Wert in der Datenbank muss größer als oder gleich dem eingegebenen Suchwert sein.
kleiner als (<)	Der Wert in der Datenbank muss kleiner als der eingegebene Suchwert sein.
kleiner als oder gleich (<-=)	Der Wert in der Datenbank muss kleiner als oder gleich dem eingegebenen Suchwert sein
Wert zwischen (a - b)	Der Wert in der Datenbank muss sich im eingegebenen (offenen) Intervall befinden
hat keinen Wert	Das entsprechende Feld in der Datenbank muss leer sein
hat einen Wert	Das entsprechende Feld in der Datenbank darf nicht leer sein

Die Suchmodi für Ja / Nein Felder sind:

ist wahr	Der Wert in der Datenbank ist gesetzt (wahre Aussage)
ist falsch	Der Wert in der Datenbank ist nicht gesetzt (falsche Aussage)

Die Auflistung aller Datenfelder und ihrer zugehörigen Suchmodi finden Sie in Anhang B. Außerdem kann noch in den vom Administrator definierten zusätzlichen Datenfeldern gesucht werden, der Typ ist hierbei von der jeweiligen Einstellung abhängig. Bitte beachten Sie, dass die Suchmodi „ist leer“ bzw. „hat keinen Wert“ dort nicht zur Verfügung stehen.

Eine neue Zeile zur Eingabe erstellen Sie mit einem Klick auf „Hinzufügen“. Mit „Entfernen“ können Sie die ausgewählte Zeile und mit „Suchanfrage leeren“ alle Zeilen löschen.

Wenn Sie das Fenster der Suchfunktionen öffnen wird die zuletzt ausgeführte Suchanfrage automatisch wieder eingetragen. Sie können Ihre Suchanfragen aber auch dauerhaft speichern. Klicken Sie dazu auf „Abfrage speichern“ und geben Sie einen Namen sowie optional einen Kommentar ein.

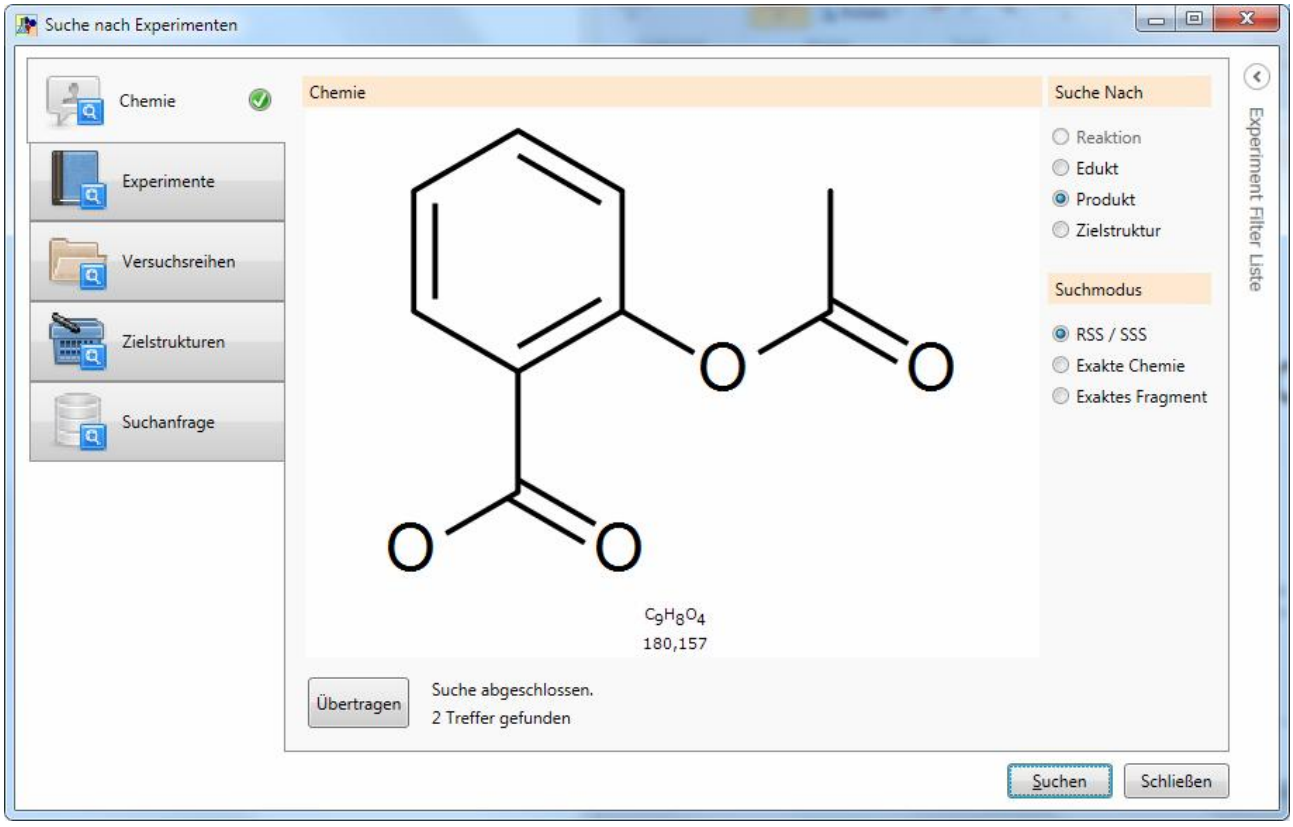
Über „Abfragen verwalten“ können Sie gespeicherte Suchanfragen wieder laden oder auch löschen. Klicken Sie dazu auf den linken Bereich des Knopfs. Ein Klick auf den rechten Bereich mit dem Pfeil öffnet ein Menü mit Ihren gespeicherten Suchanfragen für eine schnelle Auswahl.

Klicken Sie auf „Suchen”, um Ihre die Suche zu starten.

9.8. Behandlung der Suchergebnisse

Wenn Sie eine der beiden Suchen nach eigenen Experimenten ausführen, werden die Ergebnisse automatisch im Hauptfenster unter „Suchergebnisse“ aufgelistet.

Bei den anderen Suchfunktionen wird die Anzahl der gefundenen Experimente angezeigt. Sie können dann die Ergebnisse mit dem Knopf „Übertragen“ in den Navigator übernehmen oder aber eine erneute Suche mit z.B. verfeinerten Bedingungen durchführen. Jede Suchfunktion hat ihre eigene Liste mit gefundenen Treffern. Sie sehen auf dem zugehörigen „Tab“ ein Symbol das auf eine noch nicht übertragene Liste hinweist.



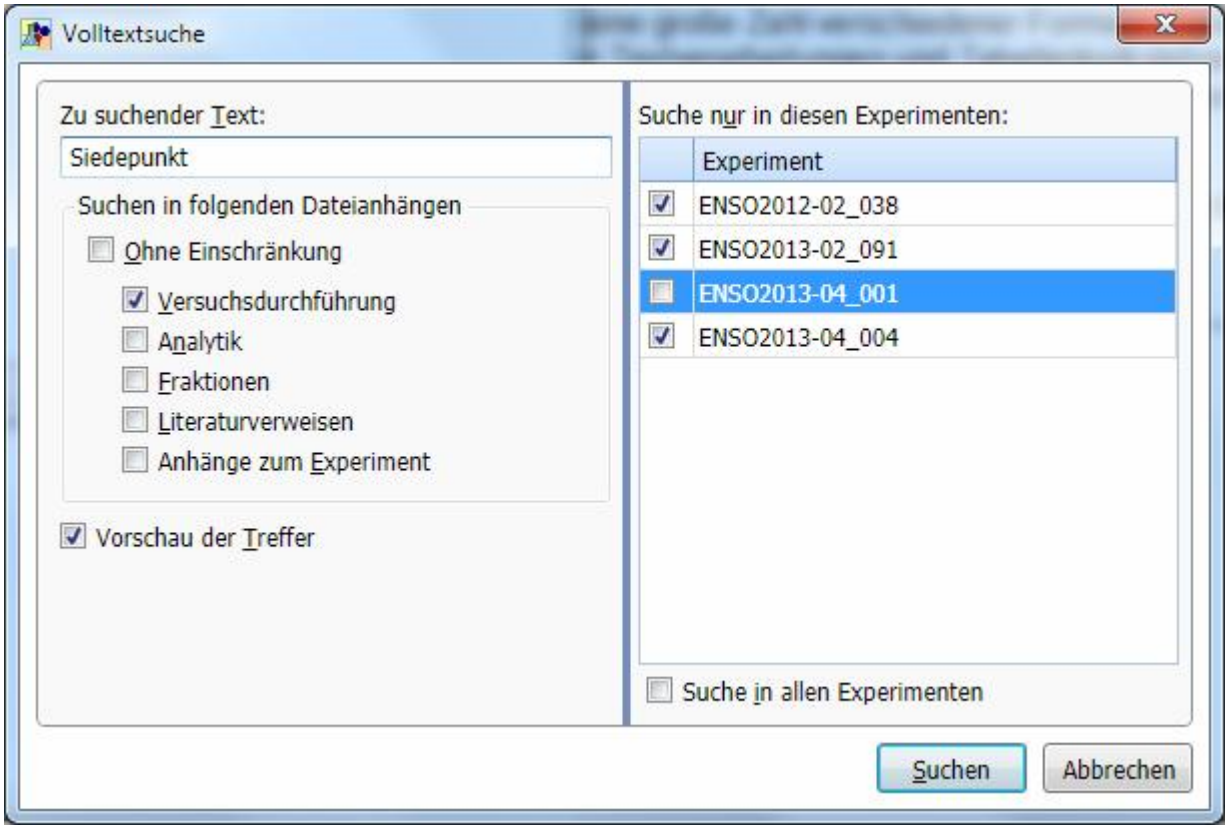
Sie müssen das Fenster der Suchfunktionen nicht schließen um mit ensochemLab weiter zu arbeiten. Damit können Sie z.B. Trefferlisten übertragen, mit Alt-Tab oder über die Taskleiste von Windows zu ensochemLab wechseln, die Liste weiter bearbeiten und dann wieder auf das Suchfenster umschalten.

Anmerkung:	Unter dem Menupunkt „Experiment -> Listenoperationen“ können Sie auch Suchergebnislisten und andere Listen mit Hilfe verschiedener Listenoperationen zu neuen Ergebnislisten mischen. Darauf wird im Kapitel „Listenoperationen“ noch näher eingehen.

9.9. Volltextsuche in Anhängen

Für Benutzer der ensochemLab Enterprise Edition für Oracle kann der Administrator eine weitere Suchfunktion zur Verfügung stellen, eine Textsuche in angehängten Binärdateien.

Wenn diese Funktion von Ihrer ensochemLab Edition unterstützt wird und vom Administrator freigegeben ist, finden sie im Menü „Suchen“ den Befehl „Text in Anhängen suchen“ mit dem Sie das folgende Fenster öffnen können:



Weitere Informationen zur Volltextsuche, Beispiele zur Eingabe von zu suchenden Texten und eine Beschreibung der Vorschaufunktion sind im separaten Dokument „Modul Volltextsuche.pdf“ zu finden.

Anmerkung:	Bitte beachten Sie, dass diese Funktionalität zurzeit nur für Oracle Datenbanken verfügbar ist.

10. Berichte

Mit ensochemLab können Sie Berichte anlegen. Ein Bericht ist eine festgelegte Suchanfrage, deren Ergebnisse nach Ihren Angaben sortiert und gruppiert sind. Sie legen dabei fest, welche Felder in die Anzeige aufgenommen werden sollen. Ist ein Bericht einmal definiert, kann er als Live-Abfrage immer wieder ausgeführt werden.

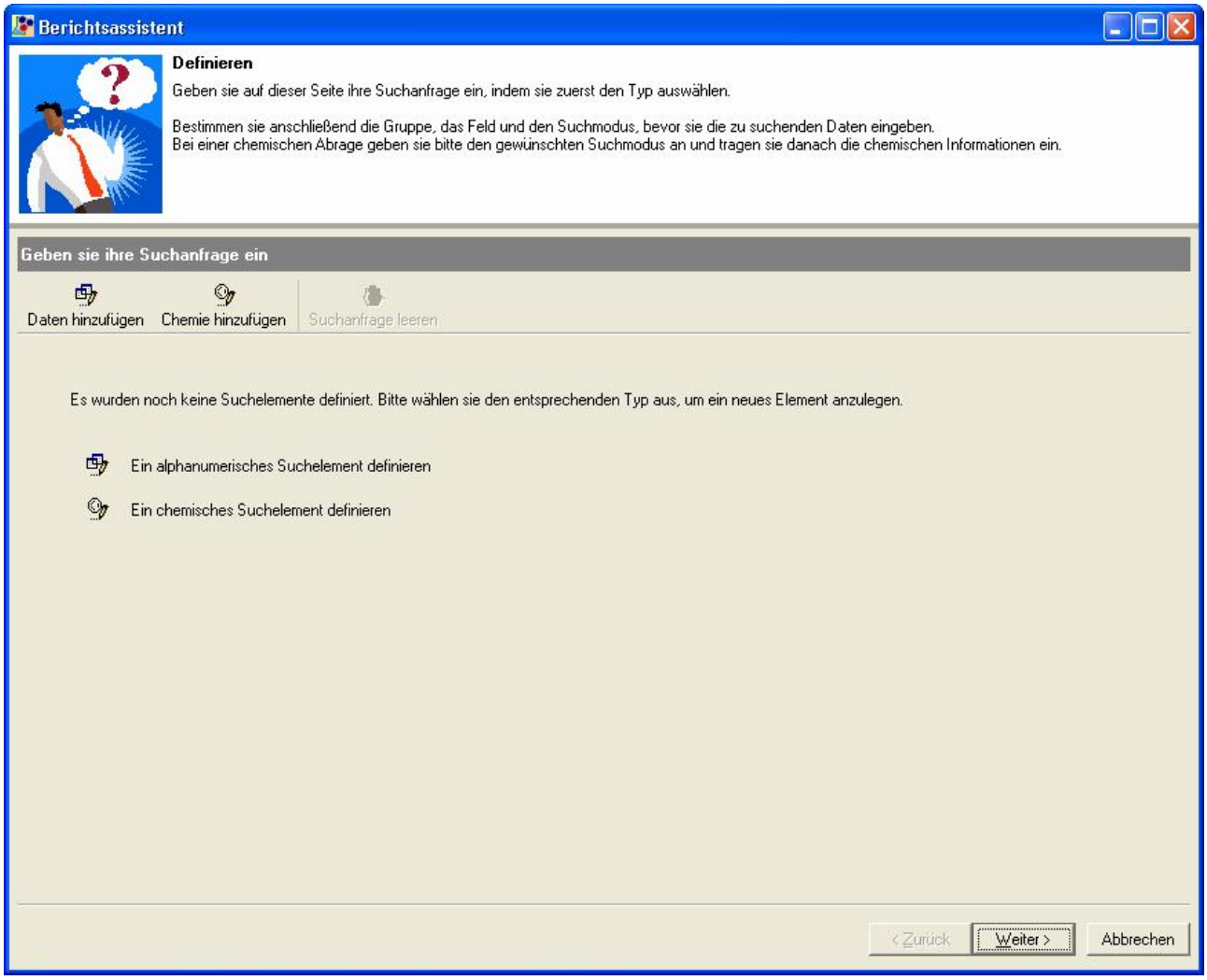
Um einen neuen Bericht anzulegen, gibt es mehrere Möglichkeiten: Sie können im Hauptmenü unter „Suchen“ auf „Berichtsassistent“ klicken oder das Kontextmenü eines Ordners in Ihrer Experimentliste verwenden. Die entsprechende Funktion findet sich hier unter „Bericht“ | „Neuer Bericht“:

Dies deutet bereits darauf hin, dass ein Bericht sich im Navigator von ensochemLab genau wie ein Experiment verhält. Sie können damit also später alle Aktionen durchführen, die Sie im Kapitel „Das Hauptfenster“ am Beispiel von Experimenten gelernt haben: Kopieren, Ausschneiden, in Ordnern gruppieren und Sortieren sind nur einige der zahlreichen Möglichkeiten.

Unabhängig davon, wie er gestartet wurde, erscheint der Berichtsassistent, der Sie durch die einzelnen Schritte der Berichtserstellung führen wird.

10.1. Abfrage definieren

Die erste Seite des Berichtsassistenten sieht wie folgt aus:


Berichtsassistent
Definieren
Geben sie auf dieser Seite ihre Suchanfrage ein, indem sie zuerst den Typ auswählen.
Bestimmen sie anschließend die Gruppe, das Feld und den Suchmodus, bevor sie die zu suchenden Daten eingeben.
Bei einer chemischen Abrage geben sie bitte den gewünschten Suchmodus an und tragen sie danach die chemischen Informationen ein.
Geben sie ihre Suchanfrage ein
Daten hinzufügen
Chemie hinzufügen
Suchanfrage leeren
Es wurden noch keine Suchelemente definiert. Bitte wählen sie den entsprechenden Typ aus, um ein neues Element anzulegen.
Ein alphanumerisches Suchelement definieren
Ein chemisches Suchelement definieren
< Zurück
Weiter >
Abbrechen

Auf dieser Seite können Sie Ihre Suchanfrage definieren. Eine Suchanfrage besteht aus so genannten „Suchelementen“. Ein Suchelement ist ein einzelnes Kriterium, das ein Experiment erfüllen muss, um mit Ihrer Abfrage gefunden zu werden und somit Teil Ihres Berichts zu sein. Es gibt alphanumerische und chemische Suchelemente.

Generell kann jedes Datenfeld Ihres Experiments durchsucht werden. Es muss mindestens ein Suchelement pro Bericht definiert werden. Ein Bericht kann beliebig viele Suchelemente enthalten, dabei kann ein Feld jedoch nur einmal angegeben sein.

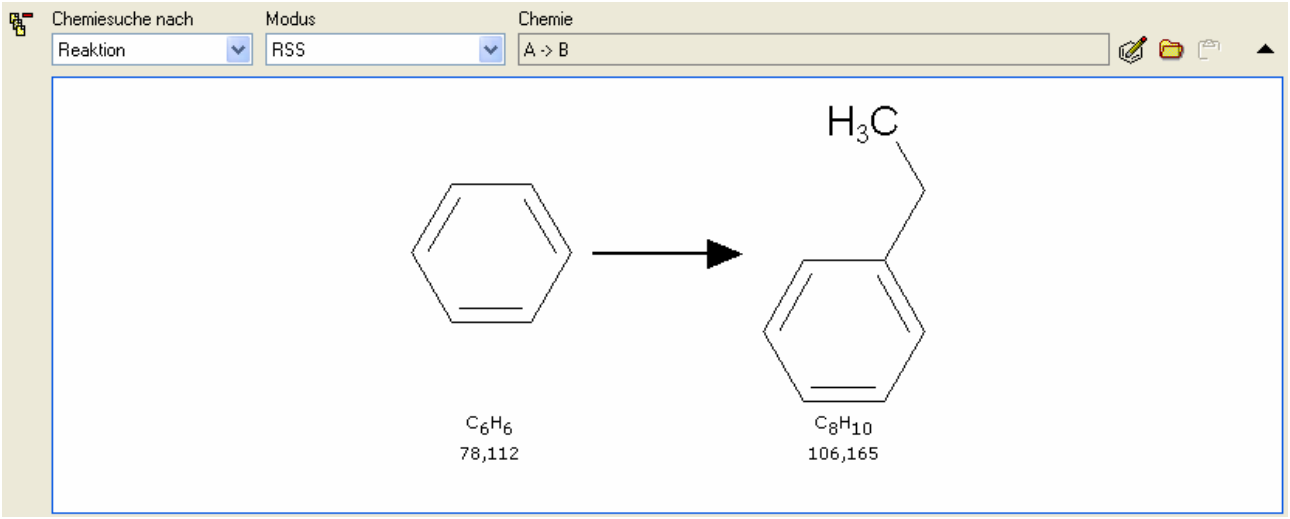
Zuerst betrachten wir ein alphanumerisches Suchelement. Klicken Sie dazu auf den Knopf „Daten hinzufügen“ in der Symbolleiste. Das Programm wird nun eine Zeile zu Ihrer Suchanfrage hinzufügen:

Mit der Auswahlbox auf der linken Seite können Sie das Kapitel in Ihrem Experiment festlegen, das Sie durchsuchen möchten. Weiter rechts finden Sie dann das konkrete Datenfeld. Der Suchmodus gibt an, in welcher Art der Datenvergleich durchgeführt werden soll. Nähere Informationen zu den Feldern und ihren jeweiligen unterstützten Suchmodi finden Sie in Anhang B („Felder und Suchmodi“). Ganz rechts können Sie dann die zu suchenden Werte angeben. Je nach Art des Datenfelds können Sie auch oder ausschließlich Werte aus einer Liste auswählen. Die möglichen Eingabewerte (Text, nur Zahlen, usw.) hängen ebenfalls vom jeweiligen Datenfeld ab.
Außer den von ensochemLab vorgegebenen Datenfeldern können Sie auch noch die vom Administrator definierten zusätzlichen Datenfelder durchsuchen. Diese befinden sich in den Kapiteln „Zusätzliche Eduktdaten“ sowie „Zusätzliche Produktdaten“. Die Suchmodi entsprechen dabei den eingestellten Feldtypen.

Wenden wir uns nun den Chemiesuchelementen zu. Klicken Sie hierfür auf den Knopf „Chemie hinzufügen“. Wieder fügt ensochemLab eine neue Zeile in die Ansicht ein:

Sie können auf der linken Seite das Feld auswählen, in dem Sie Ihre Chemiesuche durchführen möchten. Mit dem mittleren Auswahlfeld bestimmen Sie den Suchmodus. Um schließlich die zu suchende Chemie einzugeben, können Sie entweder auf den Knopf „Gesamtes Molekül / gesamte Reaktion aus der Zwischenablage einfügen“ klicken, oder mit dem Knopf „Chemie von Datei importieren“ eine MOL oder RXN Datei einlesen. Um Ihre Chemie direkt mit dem aktuell eingestellten Editor zu zeichnen, können Sie entweder auf dem Chemiefeld (dort, wo momentan der Text „< nicht definiert >“ steht) doppelklicken oder den Knopf „Chemie bearbeiten“ verwenden. Dadurch wird Ihr Chemieeditor geöffnet, wo Sie Ihre Reaktion oder Ihr Molekül zeichnen können. Nach der Rückkehr zu ensochemLab wird im Chemiefeld je nachdem entweder die schematische Reaktionsgleichung („A + B -> C + D“) oder die Summenformel angezeigt:

Sie können einen solchen Chemieeintrag auch zur erweiterten Ansicht aufklappen, in der Sie dann auch die Reaktion bzw. das Molekül sehen. Klicken Sie hierzu einfach auf „Chemiebereich anzeigen“ (Pfeilsymbol). Mit einem erneuten Klick auf den Knopf können Sie wieder zur wesentlich kompakteren Übersichtsdarstellung zurückkehren. Die erweiterte Darstellung im Bild:

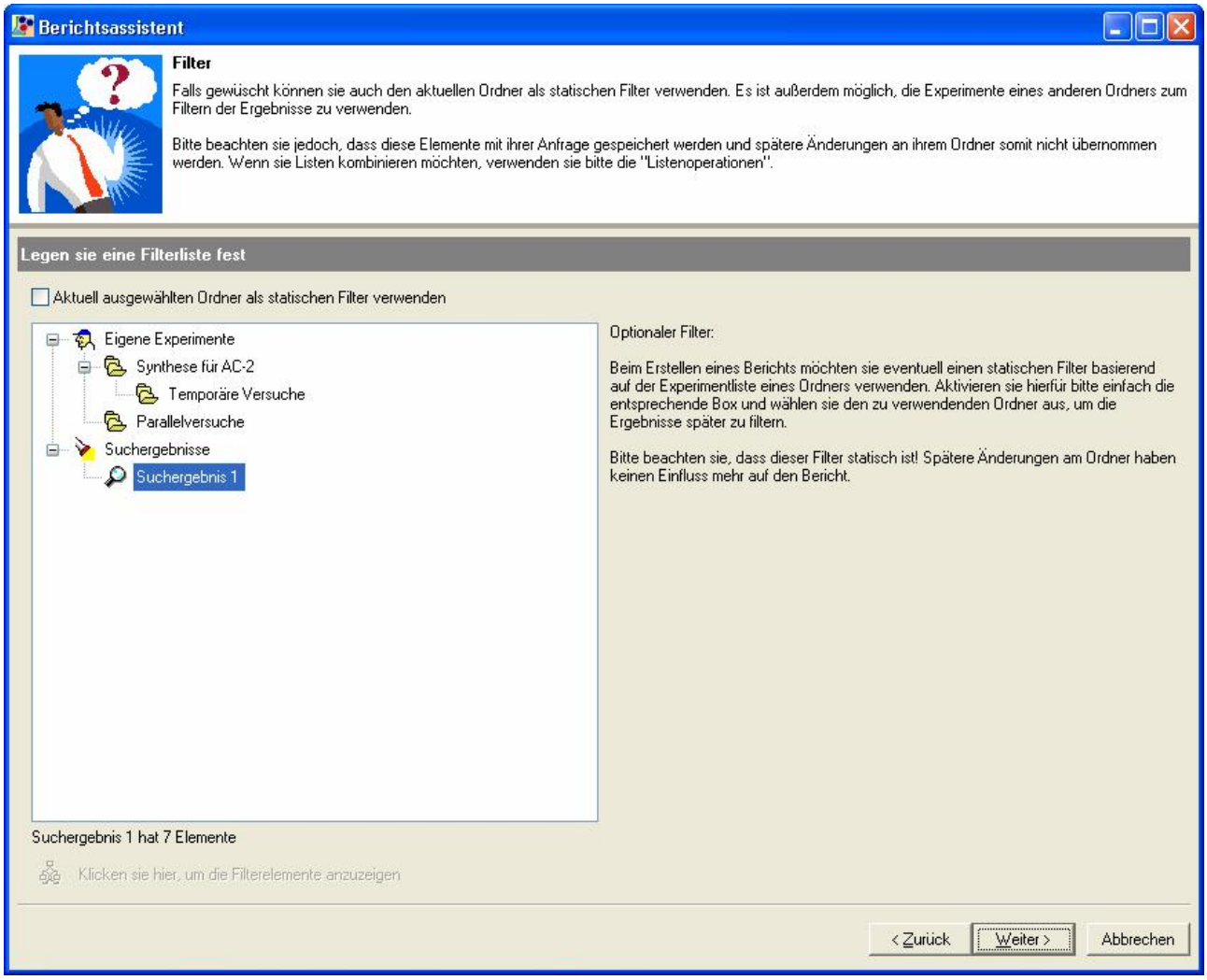


Um ein bestehendes Suchelement wieder zu löschen, klicken Sie bitte auf „Suchelement entfernen“ ( ).

Nachdem Sie Ihre Suchelemente definiert haben, klicken Sie bitte auf „Weiter“.

10.2. Statischer Filter

Auf der nächsten Seite können Sie einen statischen Filter für Ihren Bericht angeben:


Berichtsassistent
Filter
Falls gewüscht können sie auch den aktuellen Ordner als statischen Filter verwenden. Es ist außerdem möglich, die Experimente eines anderen Ordners zum Filtern der Ergebnisse zu verwenden.
Bitte beachten sie jedoch, dass diese Elemente mit ihrer Anfrage gespeichert werden und spätere Änderungen an ihrem Ordner somit nicht übernommen werden. Wenn sie Listen kombinieren möchten, verwenden sie bitte die "Listenoperationen".
Legen sie eine Filterliste fest
Aktuell ausgewählten Ordner als statischen Filter verwenden
Eigene Experimente
Synthese für AC-2
Temporäre Versuche
Parallelversuche
Suchergebnisse
Suchergebnis 1
Optionaler Filter:
Beim Erstellen eines Berichts möchten sie eventuell einen statischen Filter basierend auf der Experimentliste eines Ordners verwenden. Aktivieren sie hierfür bitte einfach die entsprechende Box und wählen sie den zu verwendenden Ordner aus, um die Ergebnisse später zu filtern.
Bitte beachten sie, dass dieser Filter statisch ist! Spätere Änderungen am Ordner haben keinen Einfluss mehr auf den Bericht.
Suchergebnis 1 hat 7 Elemente
Klicken sie hier, um die Filterelemente anzuzeigen
< Zurück
Weiter >
Abbrechen

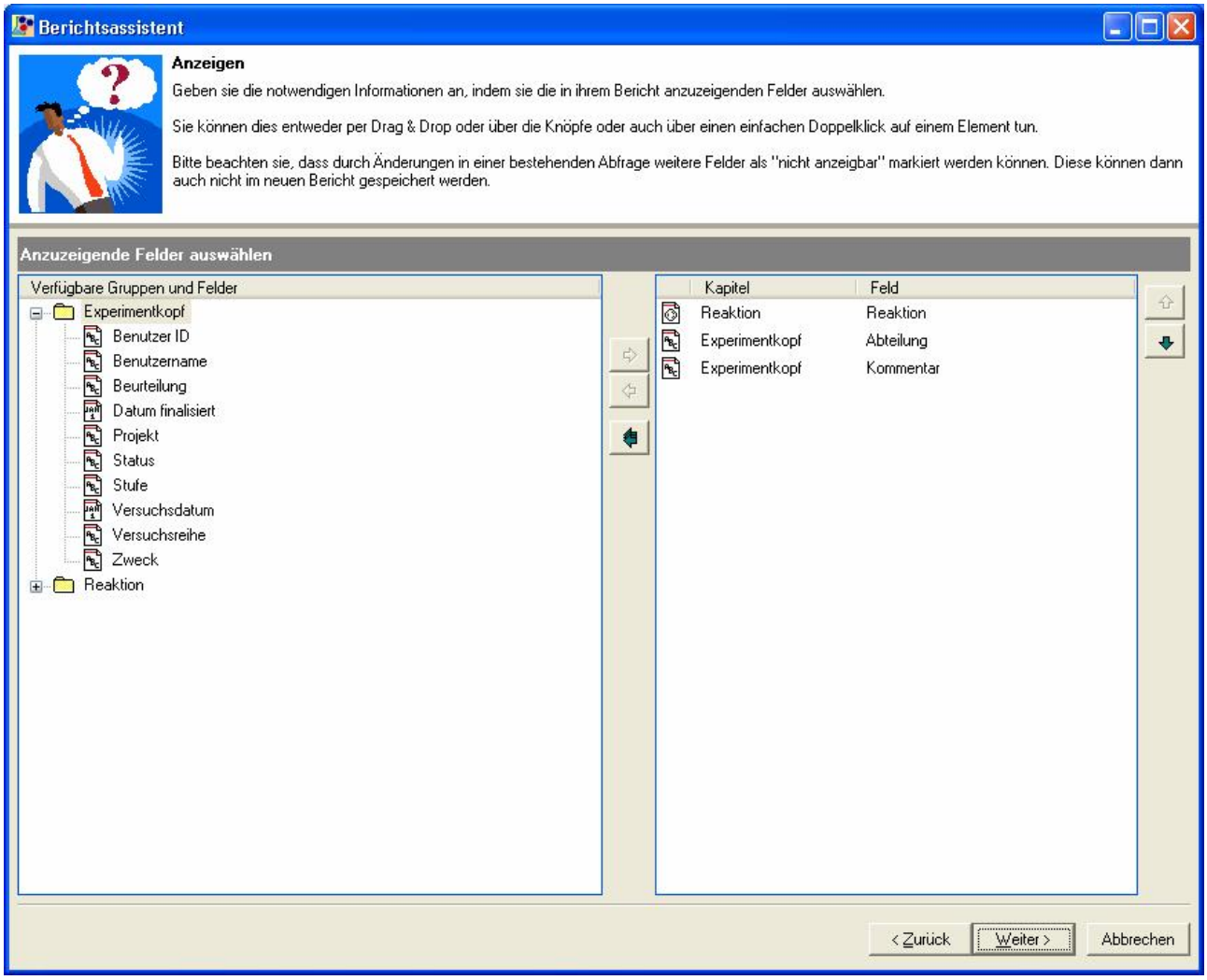
Ein statischer Filter bewirkt, dass nur Experimente mit Ihrer Suchanfrage gefunden werden, die Teil der angegebenen Filterliste sind. „Statisch“ bedeutet hierbei, dass die aktuelle Liste bzw. der aktuelle Ordner als Referenz verwendet wird. Wenn Sie später Experimente zu dem Ordner hinzufügen oder aus ihm Löschen, werden diese Änderungen nicht in den Berichtsfilter übernommen.

Um einen Filter zu verwenden, aktivieren Sie bitte die entsprechende Auswahlbox („Aktuell ausgewählten Ordner als statischen Filter verwenden“) und wählen Sie dann aus der Baumansicht den gewünschten Ordner aus. Bitte beachten Sie, dass nur ein Ordner gewählt werden kann. Falls Sie mehrere Ordner zu einer Filterliste kombinieren möchten, verwenden Sie hierfür bitte das Modul „Listenoperationen“ (siehe Kapitel „Listenoperationen“). Um die Experimente in einem Ordner anzuzeigen, können Sie auf den Knopf „Filterelemente anzeigen“ ganz unten links klicken.

Wenn Sie mit der Auswahl Ihres Filters zufrieden sind oder keinen Filter verwenden möchten, klicken Sie bitte auf „Weiter“, um mit der Erstellung Ihres Berichts fortzufahren.

10.3. Datenfelder für Anzeige

Auf der nächsten Seite können Sie die im Bericht anzuzeigenden Datenfelder auswählen:



In der Liste auf der linken Seite sehen Sie nach Bereichen gruppiert alle Datenfelder, die entweder vordefiniert (Reaktion) oder Teil Ihrer Suchabfrage sind. Die zusätzlichen Datenfelder sind immer sichtbar, wenn ihr entsprechender Bereich verfügbar ist (die zusätzlichen Eduktdaten also wenn die normalen Eduktdaten auch angezeigt werden). Sie können in Ihrem Bericht auch nur die hier sichtbaren Datenfelder für die Anzeige auswählen. In der rechten Liste werden alle anzuzeigenden Felder gesammelt.

Um ein Feld in den Bericht aufzunehmen, markieren Sie es bitte und klicken Sie dann auf „Feld anzeigen“. Das Feld wird nun in die rechte Liste verschoben. Um ein bereits in der rechten Liste befindliches Feld wieder zu entfernen, klicken Sie einfach auf „Feld verbergen“. Mit dem Knopf „Alle Felder löschen“ können Sie sämtliche Felder aus der rechten Liste entfernen.

Sie können natürlich auch Drag & Drop für die Auswahl in beide Richtungen verwenden. Ziehen Sie die Felder einfach von einer Liste in die andere.

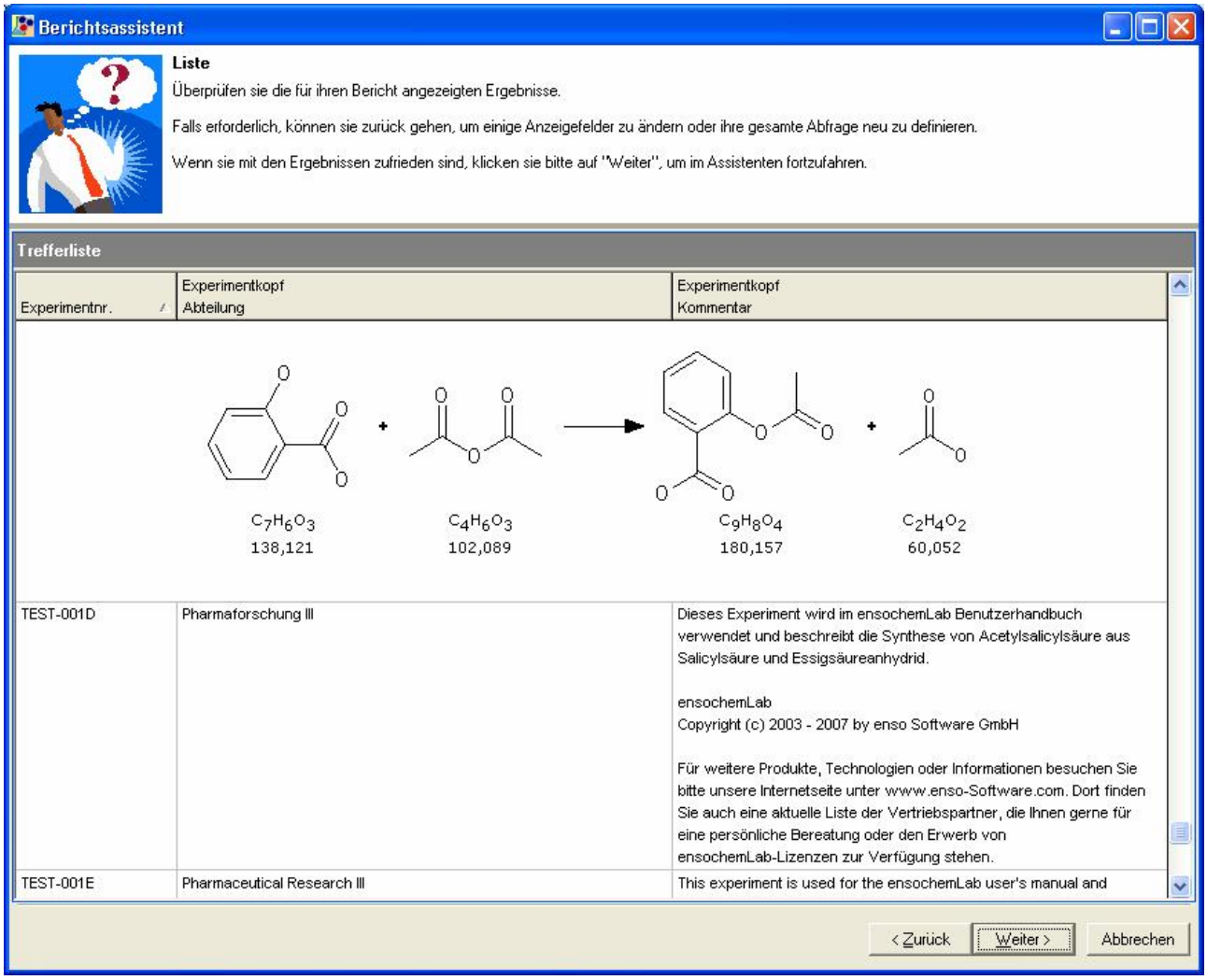
Die Reihenfolge der Datenfelder in der rechten Liste entspricht der Reihenfolge der Felder bei der späteren Anzeige. Um ein Feld zu verschieben, können Sie es entweder per Drag & Drop an seine neue Position schieben oder es auswählen und dann die Knöpfe „Nach oben“ bzw. „Nach unten“ rechts neben der Liste verwenden.

Sowohl die Funktionen zum Verschieben von Feldern zwischen den Listen als auch die für die Sortierung stehen gleichermaßen über das Kontextmenü zur Verfügung.

Mit Abschluss dieser Seite ist Ihr Bericht im Prinzip vollständig zusammengestellt. Klicken Sie nun also auf „Weiter“, um fortzufahren.

10.4. Berichtsvorschau

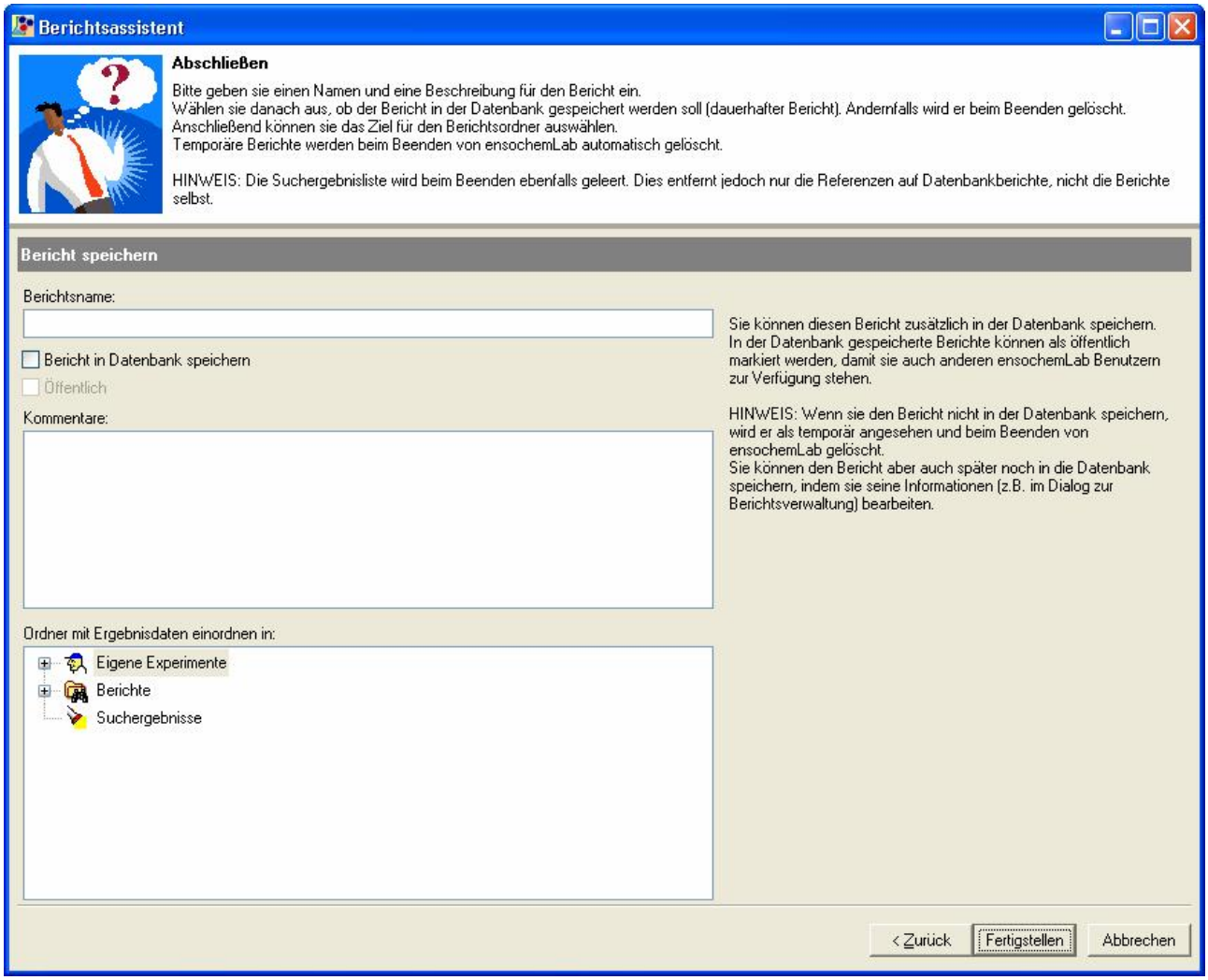
Die nächste Seite erlaubt Ihnen eine Vorschau des Ergebnisses, bevor es schließlich gespeichert wird.


Berichtsassistent
Liste
Überprüfen sie die für ihren Bericht angezeigten Ergebnisse.
Falls erforderlich, können sie zurück gehen, um einige Anzeigefelder zu ändern oder ihre gesamte Abfrage neu zu definieren.
Wenn sie mit den Ergebnissen zufrieden sind, klicken sie bitte auf "Weiter", um im Assistenten fortzufahren.
Trefferliste
Experimentnr.
Experimentkopf Abteilung
Experimentkopf Kommentar
C7H6O3 138,121
C4H6O3 102,089
C9H8O4 180,157
C2H4O2 60,052
TEST-001D
Pharmaforschung III
Dieses Experiment wird im ensochemLab Benutzerhandbuch verwendet und beschreibt die Synthese von Acetylsalicylsäure aus Salicylsäure und Essigsäureanhydrid.
ensochemLab
Copyright (c) 2003 - 2007 by enso Software GmbH
Für weitere Produkte, Technologien oder Informationen besuchen Sie bitte unsere Internetseite unter www.enso-Software.com. Dort finden Sie auch eine aktuelle Liste der Vertriebspartner, die Ihnen gerne für eine persönliche Bereatung oder den Erwerb von ensochemLab-Lizenzen zur Verfügung stehen.
TEST-001E
Pharmaceutical Research III
This experiment is used for the ensochemLab user's manual and
< Zurück
Weiter >
Abbrechen

Die Trefferliste enthält die gefundenen Experimente mit den Datenfeldern, die Sie für die Anzeige ausgewählt haben. Sie entspricht daher Ihrem Bericht zum aktuellen Ausführungszeitpunkt. Dies bietet Ihnen die Möglichkeit, das Ergebnis zu überprüfen und, falls Sie noch Änderungen durchführen möchten oder Ihre Suche zu keinen Ergebnissen führte, Ihre Suchanfrage neu definieren. Klicken Sie hierfür bitte einfach auf „Zurück“, um zu einer der vorherigen Seiten zurück zu gelangen.

Wenn Sie mit dem angezeigten Ergebnis zufrieden sind, können Sie mit einem Klick auf „Weiter“ zur letzten Seite des Assistenten gelangen.

10.5. Bericht speichern


Berichtsassistent
Abschließen
Bitte geben sie einen Namen und eine Beschreibung für den Bericht ein.
Wählen sie danach aus, ob der Bericht in der Datenbank gespeichert werden soll (dauerhafter Bericht). Andernfalls wird er beim Beenden gelöscht.
Anschließend können sie das Ziel für den Berichtsordner auswählen.
Temporäre Berichte werden beim Beenden von ensochemLab automatisch gelöscht.
HINWEIS: Die Suchergebnisliste wird beim Beenden ebenfalls geleert. Dies entfernt jedoch nur die Referenzen auf Datenbankberichte, nicht die Berichte selbst.
Bericht speichern
Berichtsname:
Bericht in Datenbank speichern
Öffentlich
Kommentare:
Sie können diesen Bericht zusätzlich in der Datenbank speichern. In der Datenbank gespeicherte Berichte können als öffentlich markiert werden, damit sie auch anderen ensochemLab Benutzern zur Verfügung stehen.
HINWEIS: Wenn sie den Bericht nicht in der Datenbank speichern, wird er als temporär angesehen und beim Beenden von ensochemLab gelöscht.
Sie können den Bericht aber auch später noch in die Datenbank speichern, indem sie seine Informationen (z.B. im Dialog zur Berichtsverwaltung) bearbeiten.
Ordner mit Ergebnisdaten einordnen in:
Eigene Experimente
Berichte
Suchergebnisse
< Zurück
Fertigstellen
Abbrechen

Auf dieser letzten Site können Sie angeben, unter welchem Namen Ihr Bericht wo gespeichert werden soll. Bitte geben Sie zuerst einen möglichst eindeutigen Namen in das Eingabefeld ein und wählen Sie anschließend den gewünschten Speicherort aus der Baumstruktur aus. Optional können Sie auch einen Kommentar für Ihren neuen Bericht angeben.

ensochemLab unterscheidet zwei Berichtstypen: Temporäre Berichte werden Ihrem Navigator gespeichert und beim Beenden des Programms verworfen. Um einen Bericht permanent zu speichern und auch in neuen Sitzungen wieder zur Verfügung zu haben, müssen Sie ihn in der Datenbank speichern. Auf dieser Seite können Sie den gewünschten Modus über das Auswahlfeld „Bericht in der Datenbank speichern“ angeben. Wird Ihr Bericht in der Datenbank gespeichert und hat Ihr Administrator die entsprechende Funktion aktiviert, können Sie Ihren Bericht zudem noch als öffentlich markieren. In diesem Fall haben auch andere ensochemLab Benutzer darauf lesenden Zugriff, d.h. diese können Ihren Bericht mit den aktuellen Daten ansehen, ihn aber nicht verändern. Die Namen öffentlicher Berichte müssen grundsätzlich eindeutig sein. Ein temporärer Bericht kann per Definition nicht öffentlich sein.
Beide Angaben können Sie auch nachträglich noch ändern. Datenbankgespeicherte Berichte können jedoch später nicht mehr zu temporären Berichten „herabgestuft“ werden.

Mit einem Klick auf „Abschließen“ speichern Sie Ihren Bericht und beenden den Assistenten.

10.6. Berichte anzeigen und verwalten

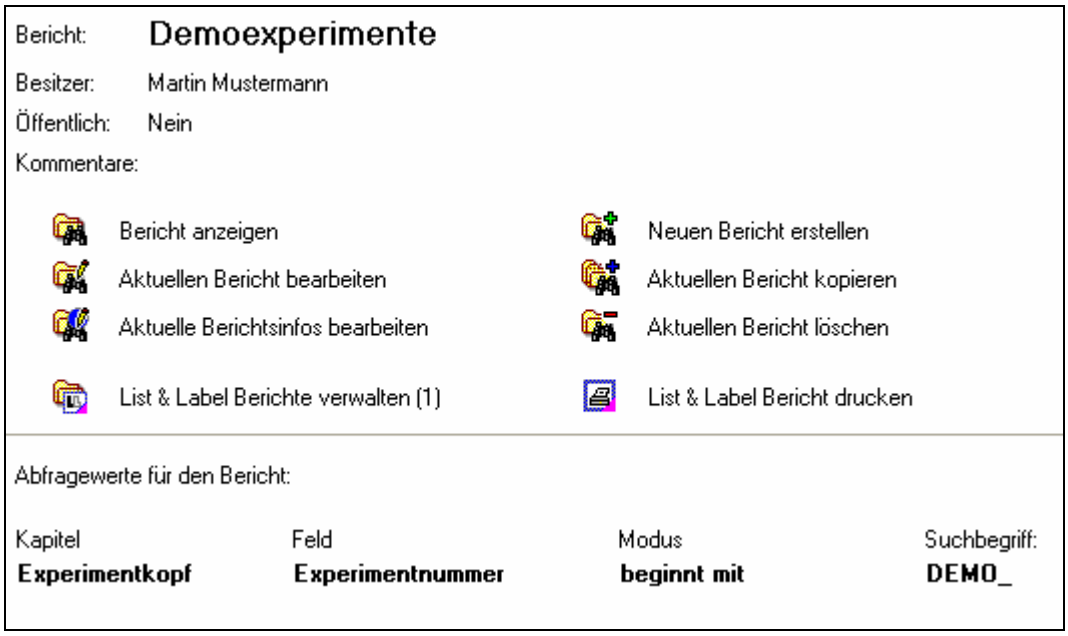
Der folgende Teil dieses Kapitels wird sich damit beschäftigen, wie Sie mit bestehenden Berichten arbeiten und welche Möglichkeiten Ihnen dabei zur Verfügung stehen.

Einen Bericht können Sie im Navigator wie ein ganz normales Experiment auswählen. Es besteht lediglich der Unterschied, dass er die enthaltenen bzw. mit Ihrer Abfrage gefundenen Experimente als Unterknoten enthält.

Wenn Sie den Bericht auswählen, wird auf der rechten Seite des Hauptfensters, wo sich normalerweise die Experimentanzeige befindet, eine Übersicht über Ihren Bericht angezeigt.

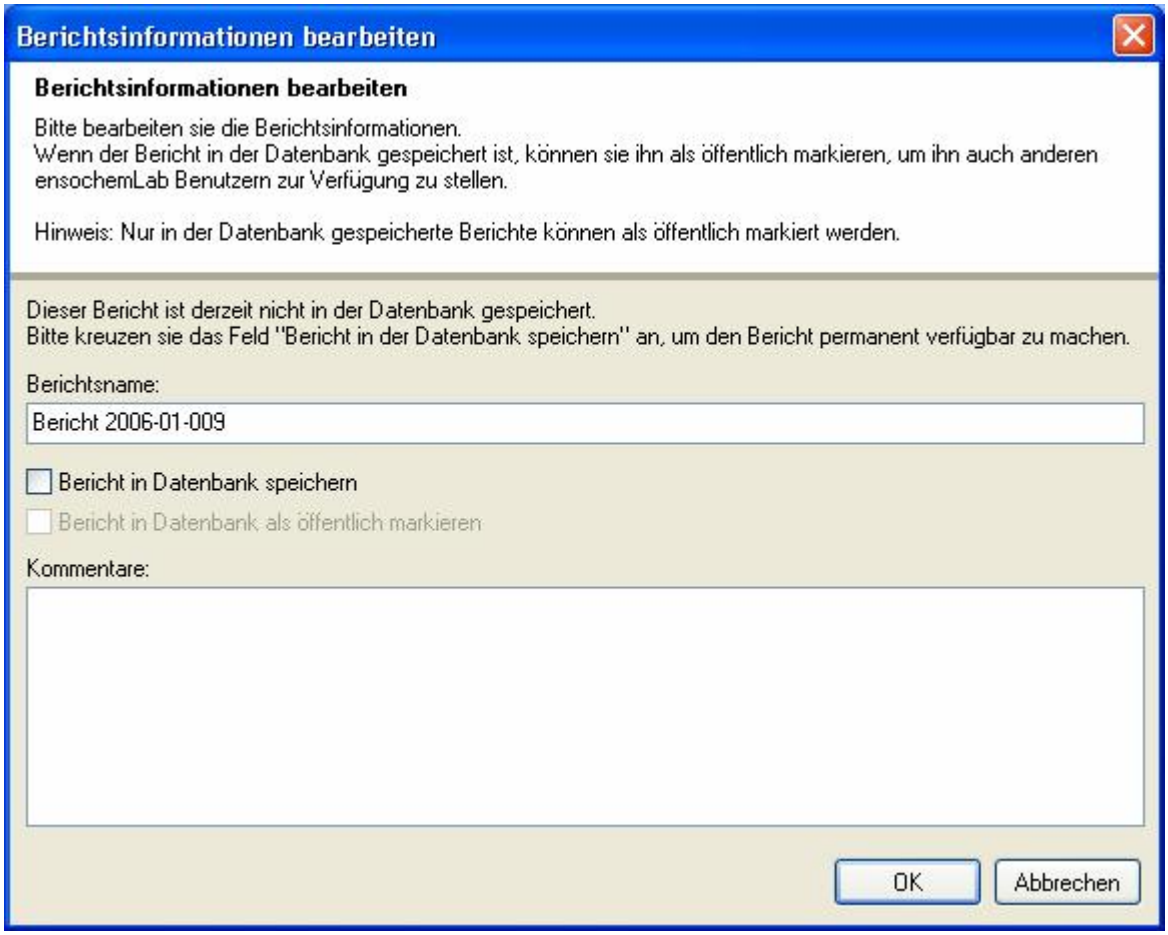
Falls Sie den Bericht soeben erstellt haben, sehen Sie direkt Ihre Berichtsdaten. Um zur Übersicht zu gelangen, klicken Sie bitte mit der rechten Maustaste auf die Anzeige und wählen Sie „Berichtsinformationen anzeigen“. Bitte beachten Sie, dass diese Umschaltung nur temporär erfolgt. Wechseln Sie also zum Beispiel zu einem anderen Bericht und kehren dann zurück, sehen Sie erneut die Berichtsdaten.

Die Übersichtsseite enthält oben die mit dem Bericht durchführbaren Aktionen sowie eine Auflistung Ihrer Suchkriterien im unteren Teil:



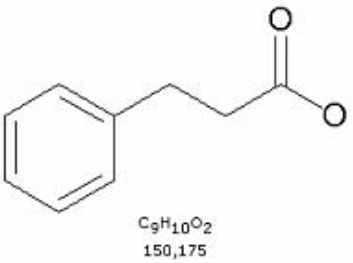
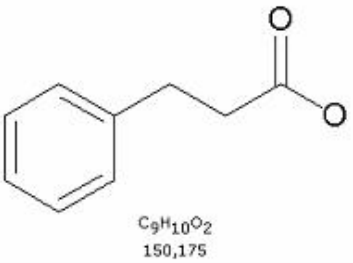
Sie können zur Erstellung eines neuen Berichts in den Berichtsassistenten zurückkehren, indem Sie auf „Neuen Bericht erstellen“ klicken. Um die Suchabfrage des aktuellen Berichts zu ändern, klicken Sie bitte auf „Aktuellen Bericht bearbeiten“. Dabei kehren Sie mit den aktuellen Daten in den Berichtsassistenten zurück.

Wenn Sie nur einige Kopfdaten wie den Namen oder den Kommentar Ihres Berichts verändern möchten, können Sie des auch getrennt mit der Funktion „Berichtsinformationen bearbeiten“ tun. Das folgende Fenster wird geöffnet:


Berichtsinformationen bearbeiten
Berichtsinformationen bearbeiten
Bitte bearbeiten sie die Berichtsinformationen.
Wenn der Bericht in der Datenbank gespeichert ist, können sie ihn als öffentlich markieren, um ihn auch anderen ensochemLab Benutzern zur Verfügung zu stellen.
Hinweis: Nur in der Datenbank gespeicherte Berichte können als öffentlich markiert werden.
Dieser Bericht ist derzeit nicht in der Datenbank gespeichert.
Bitte kreuzen sie das Feld "Bericht in der Datenbank speichern" an, um den Bericht permanent verfügbar zu machen.
Berichtsname:
Bericht 2006-01-009
Bericht in Datenbank speichern
Bericht in Datenbank als öffentlich markieren
Kommentare:
OK
Abbrechen

Hier können Sie außerdem einen Bericht nachträglich als öffentlich markieren bzw. in die Datenbank verschieben, um ihn als permanenten Bericht zu erhalten. Mit einem Klick auf „OK“ übernehmen Sie Ihre Änderungen, mit „Abbrechen“ gelangen Sie unter Beibehaltung Ihrer bisherigen Beschreibungsdaten zum Hauptfenster zurück.

Um die Daten Ihres Berichts anzuzeigen, klicken Sie bitte auf „Bericht anzeigen“. Hierbei wird der Bericht als Live-Bericht neu ausgeführt (d.h. es wird die angegebene Suche auf Basis des aktuellen Datenbestands durchgeführt) und Ihnen werden die Ergebnisse tabellarisch angezeigt. Diese Tabelle entspricht exakt der Vorschau, die Sie bereits im Berichtsassistenten gesehen haben. Mit einem Klick auf eine Spalte können Sie nach diesem Datenfeld sortieren. Ein erneuter Klick wechselt die Sortierreihenfolge (auf- oder absteigend). Außerdem können Sie Felder vertauschen, indem Sie diese einfach an eine neue Position ziehen.

Experimentnr.	Edukte Eduktstruktur	Experimentkopf Abteilung
DEMO_001		Software-Entwicklung
DEMO_002		Software-Entwicklung

Die Aktionen der Übersichtsseite finden sich in dieser Ansicht für den bequemen Zugriff im Kontextmenü wieder.

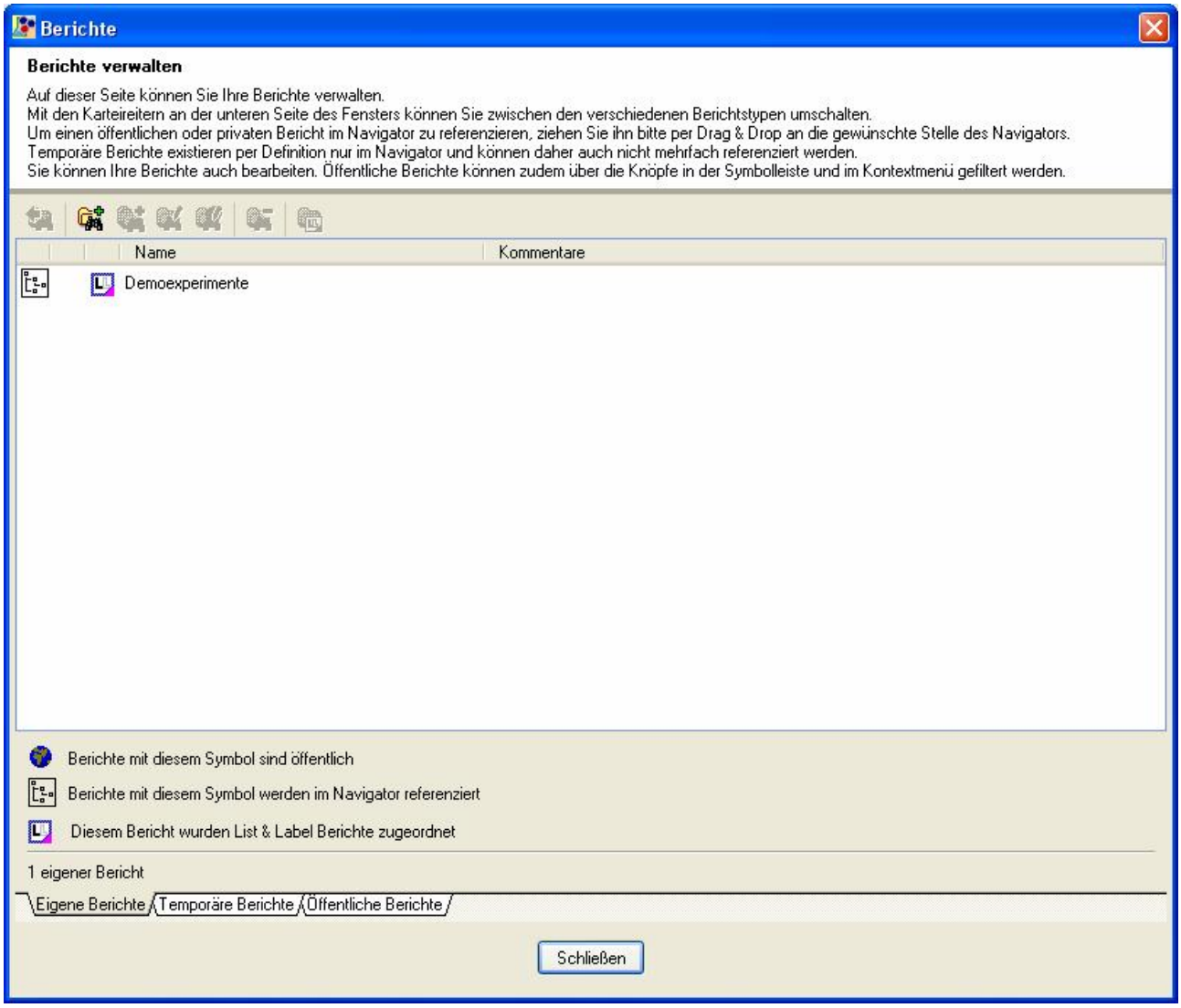
Es wurde bereits am Rande angesprochen: Ein Bericht verhält sich wie ein Experimentverweis in Ihrem persönlichen Navigator. Er bietet alle Funktionen des Verschiebens, Kopierens und Löschens, die Sie von Experimentverweisen her kennen.

Beim Löschen wird jedoch zwischen den beiden verschiedenen Berichtstypen unterschieden: Löschen Sie den Verweis auf einen temporären Bericht, so wird auch der Bericht selbst unwiderruflich gelöscht. Sie erhalten auch eine entsprechende Warnmeldung, die Sie darauf hinweist.

Ein Verweis auf einen dauerhaften (in der Datenbank gespeicherten) Bericht verhält sich dagegen grundsätzlich wie ein Experimentverweis: Der eigentliche Bericht bleibt vom Löschen des Verweises oder von Änderungen an ihm unberührt. Zur Vereinfachung Ihrer Arbeitet bietet Ihnen ensochemLab jedoch in einem Abfragedialog an, auch den Bericht selbst aus der Datenbank zu löschen.

Um einen Überblick über die derzeit zur Verfügung stehenden Berichte zu erhalten und Referenzen auf andere eigene oder fremde öffentliche Berichte zu erstellen, bietet ensochemLab einen gesonderten Dialog zur Berichtsverwaltung an. Hier können Sie auch eigene, derzeit nicht im Navigator enthaltene Berichte bearbeiten oder löschen.

Sie starten den Dialog, indem Sie mit der rechten Maustaste auf den Navigator klicken und „Bericht“ | „Berichte verwalten“ auswählen. Die gleiche Option steht Ihnen auch im Hauptmenü unter „Berichte“ zur Verfügung. Der Dialog sieht wie folgt aus:


Berichte
Berichte verwalten
Auf dieser Seite können Sie Ihre Berichte verwalten.
Mit den Karteireitern an der unteren Seite des Fensters können Sie zwischen den verschiedenen Berichtstypen umschalten.
Um einen öffentlichen oder privaten Bericht im Navigator zu referenzieren, ziehen Sie ihn bitte per Drag & Drop an die gewünschte Stelle des Navigators.
Temporäre Berichte existieren per Definition nur im Navigator und können daher auch nicht mehrfach referenziert werden.
Sie können Ihre Berichte auch bearbeiten. Öffentliche Berichte können zudem über die Knöpfe in der Symbolleiste und im Kontextmenü gefiltert werden.
Name
Kommentare
Demoexperimente
Berichte mit diesem Symbol sind öffentlich
Berichte mit diesem Symbol werden im Navigator referenziert
Diesem Bericht wurden List & Label Berichte zugeordnet
1 eigener Bericht
Eigene Berichte
Temporäre Berichte
Öffentliche Berichte
Schließen

Um unteren Rand des Fensters sehen Sie drei Karteireiter. Je nach aktuell ausgewähltem Reiter werden andere Berichte in der Liste in der Mitte des Fensters angezeigt. Über der Liste befindet sich eine Symbolleiste mit den Funktionen, die für diese Gruppe bzw. Art von Berichten möglich sind. Unterhalb der Liste finden Sie einige allgemeine Informationen (Anzahl an Berichten usw.) sowie eine kurze Legende zu den in der Liste verwendeten Symbolen.

Um eine Referenz auf einen Bericht im Navigator anzulegen, können Sie entweder den entsprechenden Listeneintrag per Drag & Drop in den gewünschten Ordner bzw. die gewünschte Navigatorgruppe ziehen oder den Knopf „In den Navigator einfügen“ verwenden.

Mit „Neu“ starten Sie den Berichtsgenerator, um einen neuen Bericht anzulegen. Die Funktion „Ausgewählten Bericht kopieren“ ermöglicht es Ihnen, eine Kopie des ausgewählten Berichts zu erstellen. Dieses Kapitel wird später noch näher darauf eingehen.
Mit „Bearbeiten“ modifizieren Sie einen bestehenden Bericht im Assistenten, wohingegen „Informationen bearbeiten“ den weiter oben beschriebenen Dialog zur Änderung von Namen und Titel aufruft.

Mit „Löschen“ entfernen Sie einen Bericht unwiderruflich aus der Datenbank. Dabei werden auch sämtliche zugeordneten List & Label Berichte gelöscht, unabhängig davon, von welchem Benutzer diese erstellt wurden.

Bitte beachten Sie, dass Sie nur eigene Berichte bearbeiten oder löschen können. Die List & Label Berichte stellen hierzu keine Ausnahme dar, da sie nur in Zusammenhang mit ihrem jeweiligen übergeordneten ensochemLab Bericht definiert sind. Die mit diesem Bericht verknüpften Berechtigungen werden auch durch die Existenz untergeordneter Objekte nicht verändert.

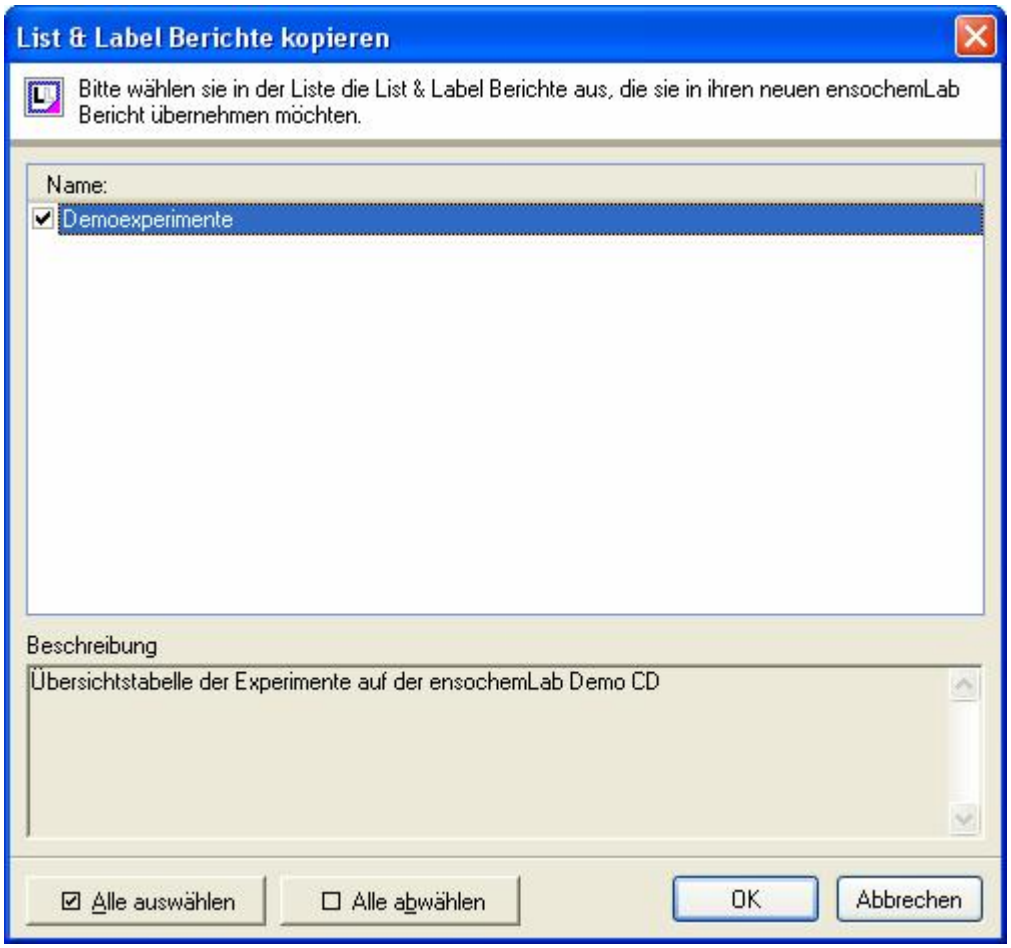
Mit einem Klick auf „List & Label Berichte verwalten“ öffnen Sie den Verwaltungsdialog für List & Label Berichte, auf den später noch ausführlich eingegangen wird.

Da es eine große Menge öffentlicher Berichte geben kann, unterstützt die zugehörige Seite noch zwei Filterfunktionen, um die Anzeige einzuschränken. Diese finden Sie im Filtermenü. Mit „Nach Name filtern“ blenden Sie nur die Berichte ein, deren Name einen bestimmten Text enthält. Analog dazu blendet „Nach Kommentar filtern“ nur Berichte ein, die einen bestimmten Text im Kommentar enthalten.
Um wieder alle Berichte anzuzeigen, d.h. den aktuellen Filter zu deaktivieren, klicken Sie bitte auf „Nichts filtern“.

Mit einem Klick auf „Schließen“ verlassen Sie den Dialog und kehren zum Hauptfenster zurück.

Das bereits mehrfach angesprochene Kopieren von Berichten bedeutet, dass der Berichtsassistent mit einer Kopie der Daten des aktuellen Berichts geöffnet wird. Sie können den Dialog dann ganz normal verwenden und, falls gewünscht, beliebige Änderungen an Ihrer Kopie durchführen. Auf der letzten Seite empfiehlt es sich, einen andren Namen zu wählen, bei öffentlichen Berichten ist dies sogar zwingend erforderlich. Klicken Sie auf „Abschließen“ um den Assistenten zu beenden.

Wenn dem Originalbericht List & Label Berichte zugeordnet wurden, erhalten Sie einen Dialog, in dem Sie auswählen können, welche dieser zugeordneten Berichte Sie kopieren möchten:


List & Label Berichte kopieren
Bitte wählen sie in der Liste die List & Label Berichte aus, die sie in ihren neuen ensochemLab Bericht übernehmen möchten.
Name:
Demoexperimente
Beschreibung
Übersichtstabelle der Experimente auf der ensochemLab Demo CD
Alle auswählen
Alle abwählen
OK
Abbrechen

Ihr ensochemLab Bericht wurde zu diesem Zeitpunkt bereits erzeugt. Um keinen der List & Label Berichte zu kopieren, können Sie daher einfach auf „Abbrechen“ klicken.
Wählen Sie ansonsten die List & Label Bericht aus, die sie kopieren möchten. Mit einem Klick auf „Alle auswählen“ wählen Sie alle Einträge in der Liste aus, „Alle abwählen“ entfernt sämtliche Häkchen. Klicken Sie anschließend auf „OK“, um den Vorgang abzuschließen.

10.7. List & Label Berichte

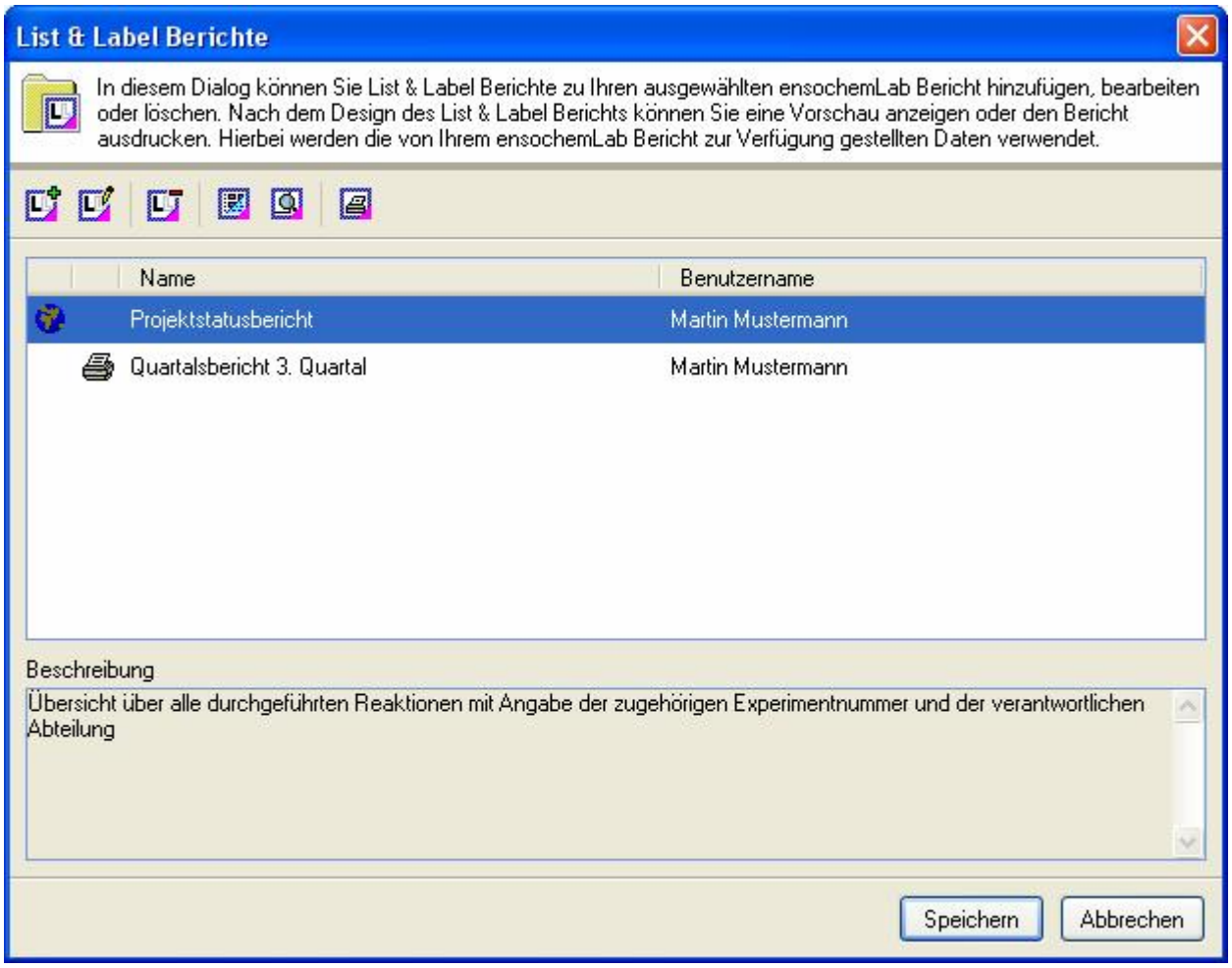
Bisher haben Sie nur normale ensochemLab Berichte verwendet. Diese verfügen über ein größtenteils vorgegebenes Tabellenlayout, das Sie nicht direkt verändern können. So können Sie zum Beispiel keine spezielle, datenabhängige Farbgebung für die Tabelle einstellen.

Darüber hinaus gibt es noch die List & Label Berichte. Sie bauen auf einem bestehenden ensochemLab Bericht auf, aus dem sie ihre Daten beziehen. Alle weiteren (Anzeige-)Optionen konfigurieren Sie selbst. Das folgende Beispiel erstellt ein einfaches verschiedenfarbiges Tabellenlayout.

Um zu beginnen, wählen Sie bitte Ihren weiter vorne in diesem Kapitel erstellten Bericht im Navigator aus. Um den Verwaltungsdialog für List & Label Berichte zu öffnen, stehen Ihnen nun drei Möglichkeiten zur Auswahl:

1. Zeigen Sie die Berichtsinformationen an und klicken Sie dort auf den Link „List & Label Berichte“.
2. Verwenden Sie das Kontextmenü des entsprechenden Navigatoreintrags und wählen Sie dort „Bericht“ | „List & Label Berichte“.
3. Wechseln Sie in eine beliebige Ansicht des Berichts und klicken Sie im Hauptmenü unter „Bericht“ auf „List & Label Berichte“.

In jedem Fall erscheint das folgende Fenster, das bei Ihnen anfangs noch leer sein wird:


List & Label Berichte
In diesem Dialog können Sie List & Label Berichte zu Ihren ausgewählten ensochemLab Bericht hinzufügen, bearbeiten oder löschen. Nach dem Design des List & Label Berichts können Sie eine Vorschau anzeigen oder den Bericht ausdrucken. Hierbei werden die von Ihrem ensochemLab Bericht zur Verfügung gestellten Daten verwendet.
Name
Benutzername
Projektstatusbericht
Martin Mustermann
Quartalsbericht 3. Quartal
Martin Mustermann
Beschreibung
Übersicht über alle durchgeführten Reaktionen mit Angabe der zugehörigen Experimentnummer und der verantwortlichen Abteilung
Speichern
Abbrechen

Um einen neuen List & Label Bericht anzulegen, klicken Sie bitte auf „Neuer List & Label Bericht“. Daraufhin startet ensochemLab den List & Label Berichtsdesigner. Hierbei handelt es sich um ein externes Modul, das über eine eigenständige Hilfedatei verfügt. Sie können diese über den Menüpunkt „?“ | „Übersicht aufrufen“. Außerdem können Sie die F1 Taste verwenden, um direkt den Hilfeeintrag zur aktuellen Funktion oder Einstellung anzuzeigen. Daher wird dieses Handbuch auch nur die Erstellung des Beispielberichts demonstrieren, jedoch nicht weiter auf den Designer selbst eingehen.

Beim Erstellen neuer Layouts ist Ihnen der Assistent des Designers behilflich. Der erste Schritt besteht darin, den zu verwendenden Drucker angeben. Anhand der Einstellungen dieses Druckers (z.B. Papiergröße und -Format) wird später Ihr Bericht berechnet. Außerdem können Sie angeben, wie Ihre Tabelle formatiert werden soll und ob ein Titel bzw. eine Zusammenfassung erzeugt werden sollen.

Der wichtigste Schritt besteht in der Auswahl der Felder, die in Ihre Tabelle aufgenommen werden sollen. Hierbei stehen Ihnen alle Felder Ihres ensochemLab Berichts zur Verfügung. Wie bereits angesprochen bereitet ein List & Label Bericht immer die Daten eines ensochemLab Berichts auf. Aus diesem Grund ist es auch nicht möglich, weitere Datenfelder einzubinden. Wenn Sie dies tun möchten, müssen Sie zuerst Ihren ensochemLab Bericht entsprechend erweitern.

Nachdem Sie den Assistenten abgeschlossen haben, befinden Sie sich im Hauptfenster des Designers, wo Sie weitere Änderungen an Ihrem Bericht vornehmen können. Für dieses Beispiel können Sie probeweise folgendes einstellen:

1. Der Titel wird auf „Projektergebnisse 3. Quartal“ geändert.
2. Unter dem Titel wird ein weiteres Textfeld mit dem Inhalt „Ergebnisse im 3. Quartal – Projektstatusübersicht“ eingefügt.
3. Neben dem Titel wird eine Ellipse mit blauem Rand (1cm dick) angezeigt, in der sich ein Textfeld mit dem Inhalt „Vertraulich“ befindet.
4. Die Spaltenüberschriften werden in „Experimentnummer“, „verantwortliche Abteilung“ und „Reaktion“ geändert.

Selbstverständlich sind noch sehr viel weiter gehende Änderungen am Berichtslayout möglich. So können Sie zum Beispiel Bilder einbinden, komplexe Tabellenlayouts anwenden oder beliebige Objekteigenschaften ändern. Außerdem ist der Einsatz dynamischer Elemente möglich. Dazu zählt Inhalte nur unter bestimmten Bedingungen anzuzeigen (z.B. eine Hervorhebung nur wenn ein Experiment noch nicht abgeschlossen ist), Feldwerte dynamisch zu berechnen (z.B. Anzahl der noch nicht abgeschlossenen Experimente), Barcodes zu generieren (z.B. einen Barcode für die Flasche, in der das Produkt abgegeben wird) und vieles mehr.

Damit Ihr Bericht später korrekt angezeigt werden kann, muss er eine Datentabelle enthalten. Diese muss dabei aber nicht zwingend Datenzeilen besitzen.

Wenn Sie Ihr Layout erstellt haben, beenden Sie bitte den Designer und beantworten Sie die Frage, ob Sie Ihre Änderungen speichern möchten, mit „Ja“. Wählen Sie dann einen beliebigen Ort auf Ihrem Computer, auf dem Sie Ihre Layoutdefinition speichern möchten. Natürlich können Sie auch während der Erstellung bereits speichern.

Bitte beachten Sie, dass Ihr Bericht im nächsten Schritt in die ensochemLab Datenbank übernommen wird. Ihre lokale Datei wird danach nicht mehr benötigt. Sie müssen bei der Auswahl also nicht darauf achten, einen für alle Benutzer verfügbaren Speicherort zu wählen.

Sie kehren nun zu ensochemLab zurück. Wie bereits angesprochen übernimmt das Programm dabei Ihre Berichtsdefinition. Sie erhalten die Frage, ob Sie die soeben erstellte lokale Datei beibehalten oder löschen möchten. Grundsätzlich besteht keine Notwendig zur Beibehaltung der Datei, es sei denn Sie möchten diese noch anderweitig (d.h. außerhalb von ensochemLab) verwenden. Auf diese Art können Sie sich zum Beispiel aber auch Vorlagen für weitere, abgewandelte Berichte erzeugen.

Bitte beachten Sie jedoch, dass Ihre gewählte Option sofort ausgeführt wird. Wählen sie also „Löschen“ aus, wird die Datei entfernt, auch wenn Sie die Erstellung des Berichts später abbrechen.

Eventuell ist Ihnen aufgefallen, dass es sich genau genommen nicht um eine, sondern um drei Berichtsdateien handelt. Trägt Ihre Berichtsdefinition den Namen „Quartalsbericht“, so heißen diese Dateien „Quartalsbericht.lst“, „Quartalsbericht.lsv“ und „Quartalsbericht.lsp“. Innerhalb ensochemLab sowie des Berichtsdesigners werden diese Dateien jedoch immer als Einheit behandelt.

Der nächste erscheinende Dialog widmet sich dem eigentlichen Speichervorgang:

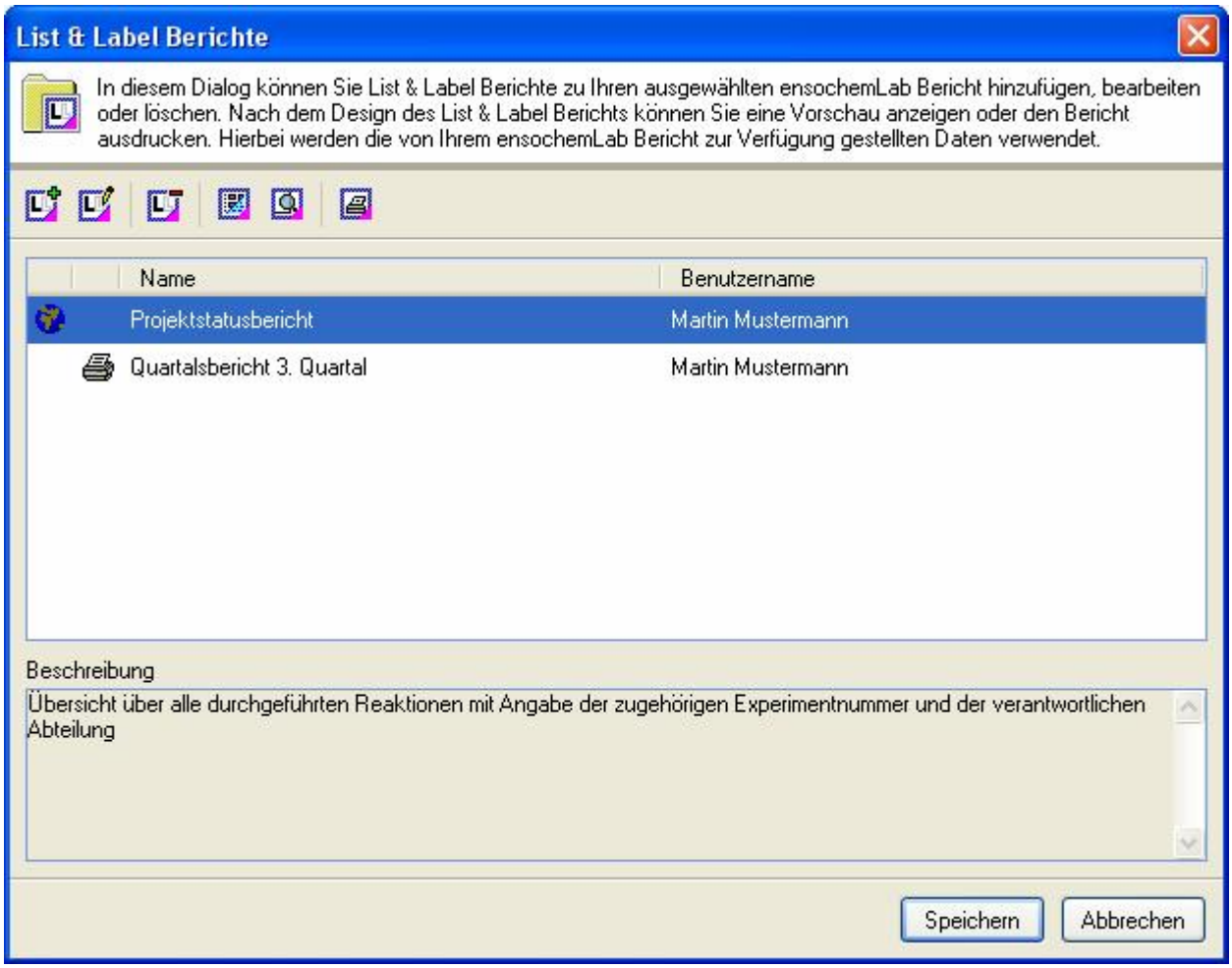
Hier können Sie einen Namen und eine Beschreibung eingeben, unter dem Sie den Bericht in die Datenbank speichern möchten. Falls Ihr Administrator die entsprechende Funktion aktiviert hat, können Sie Ihren Bericht zudem als öffentlich markieren, um ihn allen ensochemLab Anwendern zur Verfügung zu stellen. Bitte beachten Sie jedoch, dass die Namen öffentlicher Berichte eindeutig sein müssen.

Zusätzlich können Sie einstellen, ob Sie den bei der Erzeugung des Berichts ausgewählten Drucker als Standarddrucker für diesen Bericht definieren möchten.

Mit einem Klick auf „OK“ übernehmen Sie Ihren Bericht in die Übersichtsliste. Mit dem „Abbrechen“ Knopf kehren Sie zum Verwaltungsdialog zurück, ohne Ihren neuen Bericht zu übernehmen.

Wenn Sie einen Bericht neu erzeugen, können Sie selbstverständlich auch den Assistenten abbrechen und eine bestehende Datei von Ihrer lokalen Festplatte laden, um diese in die Datenbank zu übernehmen. Ändern Sie das Layout eines bestehenden Berichts und laden dabei eine andere Datei von der Festplatte, ohne den Ursprungsbericht zu ändern, werden Sie gefragt, ob Sie den aktuellen Bericht in der Datenbank mit dieser Datei ersetzen möchten. Ändern Sie beide Dateien, können Sie zwischen einer der Dateien sowie einem vollständigen Abbruch wählen.

Ihr Verwaltungsdialog für List & Label Bericht enthält nun einen Datensatz. Daher ist es nun an der Zeit, seine restlichen Funktionen zu besprechen.


List & Label Berichte
In diesem Dialog können Sie List & Label Berichte zu Ihren ausgewählten ensochemLab Bericht hinzufügen, bearbeiten oder löschen. Nach dem Design des List & Label Berichts können Sie eine Vorschau anzeigen oder den Bericht ausdrucken. Hierbei werden die von Ihrem ensochemLab Bericht zur Verfügung gestellten Daten verwendet.
Name
Benutzername
Projektstatusbericht
Martin Mustermann
Quartalsbericht 3. Quartal
Martin Mustermann
Beschreibung
Übersicht über alle durchgeführten Reaktionen mit Angabe der zugehörigen Experimentnummer und der verantwortlichen Abteilung
Speichern
Abbrechen

Zu jedem existierenden Bericht sehen Sie den Namen und den zugehörigen Besitzer. Grundsätzlich ist es auch möglich, zu fremden ensochemLab Berichten List & Label Berichte zu erstellen. Hierbei sollten Sie jedoch beachten, dass Sie keinen Einfluss auf den Ursprungsbericht haben. Dies bedeutet nicht nur, dass Sie die zur Verfügung stehenden Datenfelder nicht ändern können, sondern insbesondere auch, dass der Besitzer seinen Bericht jederzeit so abändern kann, dass Ihre List & Label Berichte nicht mehr funktionieren (z.B. wenn ein verwendetes Datenfeld aus dem Ursprungsbericht entfernt wird). Auch kann er den Bericht jederzeit löschen, wodurch Ihr List & Label Bericht ebenfalls gelöscht wird.

Auch bei eigenen Berichten sollten Sie beachten, dass spätere Änderungen am Ursprungsbericht eventuell negative Auswirkungen auf zugeordnete List & Label Berichte haben können.

Beide Probleme können Sie vermeiden, indem Sie zuerst eine Kopie des zugrunde liegenden Berichts erstellen.

Die Weltkugel bei einem Datensatz zeigt an, dass es sich um einen öffentlichen Bericht handelt. Ist das Druckersymbol sichtbar, wurde ein Standarddrucker festgelegt. Nach dem Klick auf einen Eintrag wird im unteren Feld seine Beschreibung angezeigt.

Um die Beschreibungsdaten eines Berichts zu bearbeiten, wählen Sie diesen bitte aus und klicken Sie dann auf „List & Label Bericht bearbeiten“. Sie erhalten dabei das bereits von der Berichtserzeugung bekannte Fenster.

Um das Layout eines Berichts im Designer zu verändern, klicken Sie bitte auf „List & Label Bericht entwerfen“. Wenn Sie ensochemLab in mehreren Sprachen verwenden, enthält der Designer bei dieser Operation die Namen der Datenfelder in der Sprache, mit der der Bericht ursprünglich erstellt wurde. Dies lässt sich auch im Nachhinein nicht mehr ändern und hat betrifft nur den Designer.
Mit einem Klick auf „List & Label Bericht löschen“ löschen Sie den ausgewählten Datensatz.

Wie bei normalen Berichten können Sie nur eigene Datensätze bearbeiten oder löschen. Bei der Bearbeitung betrifft dies sowohl die Beschreibungsdaten als auch das Layout.

Bitte beachten Sie, dass bislang noch keine Daten tatsächlich gespeichert wurden. Wenn Sie den Dialog nun also mit „Abbrechen“ schließen, machen Sie sämtliche vorgenommenen Änderungen rückgängig. Mit einem Klick auf „OK“ werden Ihre Änderungen gespeichert.

Um einen List & Label Bericht auszudrucken oder die zugehörige Druckvorschau anzuzeigen, klicken Sie bitte auf „Vorschau List & Label Bericht“. In diesem Fenster stehen Ihnen Funktion zum Drucken, Speichern in verschiedenen Dateiformaten (darunter PDF) sowie zum Blättern und Zoomen der Ansicht zur Verfügung. Den Ausdruck können Sie entweder auf dem Standarddrucker vornehmen, indem Sie normal auf das Druckersymbol klicken, oder Sie können die rechte Maustaste verwenden, um einen Druckerauswahldialog zu erhalten.
Schließen Sie nach Beendigung Ihrer Arbeit mit diesem Modul einfach den Dialog, um zum Verwaltungsdialog für List & Label Berichte zurückzukehren.

Natürlich können Sie auch direkt drucken, ohne zuerst den Vorschaudialog öffnen zu müssen. Klicken Sie hierzu einfach auf „List & Label Bericht drucken“. Es erscheint der folgende Dialog, in dem Sie das Ziel Ihres Ausdrucks angeben können:

Voreingestellt ist hierbei die Ausgabe auf einem normalen Drucker, den Sie mit einem Klick auf „Ändern“ wechseln können. Über diesen Knopf ist auch eine Konfiguration möglich, um z.B. das Papierformat oder die Qualitätsoptionen einzustellen. Zudem können Sie für die Titelseite einen anderen Drucker verwenden als für die restlichen Seiten, um z.B. das Deckblatt auf einem Tintenstrahler bunt und die tabellarischen Daten kostenbewusst auf einem Schwarzweiß-Laser zu drucken.

Neben der Ausgabe auf dem Drucker können Sie auch auf verschiedene andere Medien „drucken“. Die folgende Liste bietet hierzu eine Übersicht:

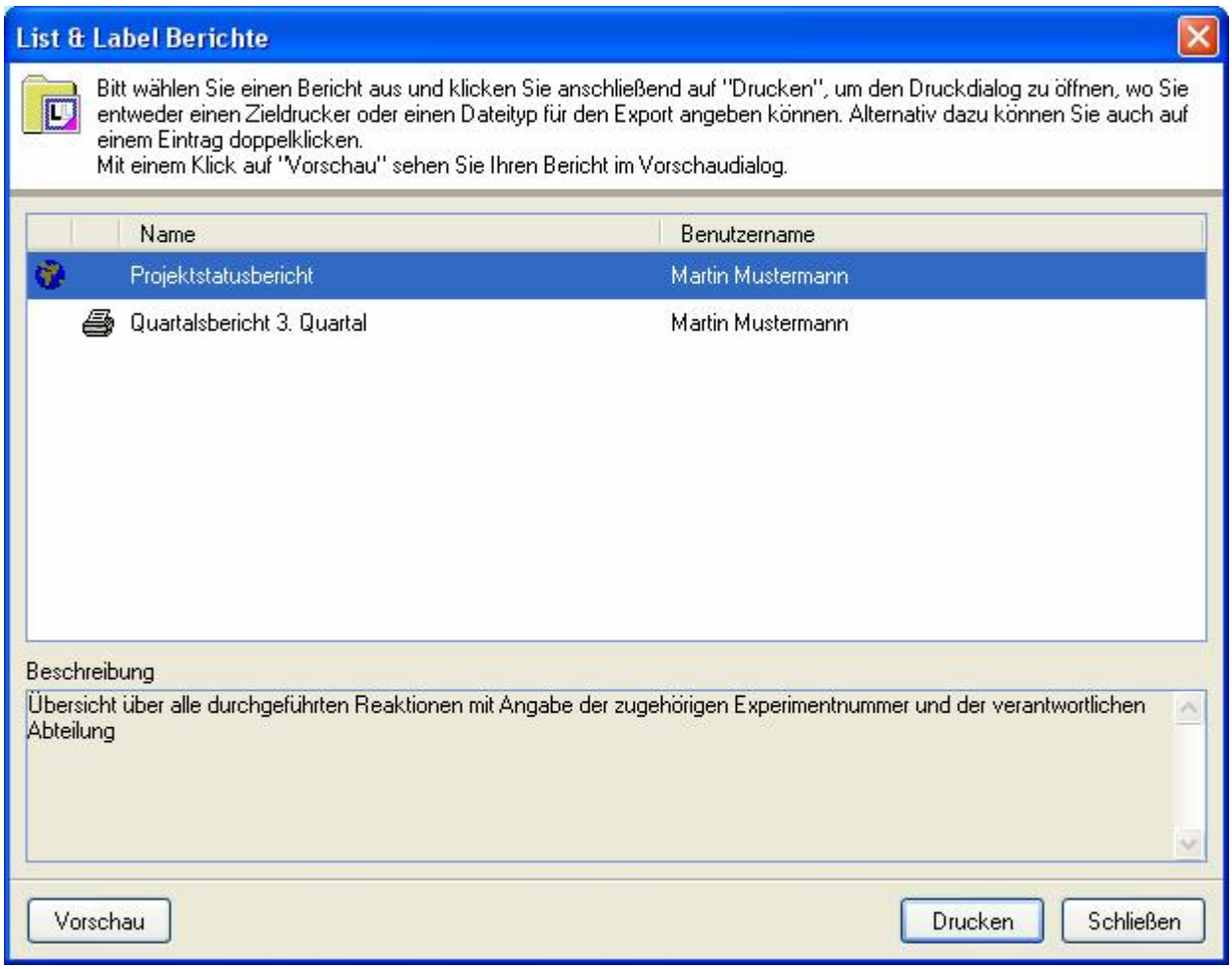
Ausgabemedium	Beschreibung
Drucker	Es erfolgt ein realer Ausdruck auf dem gewählten Drucker, siehe Kapiteltext.
Vorschau	Das Vorschaufenster wird mit den Berichtsdaten geöffnet. Dies entspricht einem Klick auf den Knopf „Vorschau List & Label Bericht“.
Datei	Es wird eine Druckerausgabedatei erstellt.
HTML-Format	Es wird eine eventuell aus mehreren Dateien bestehende Webseite erstellt.
Multi-Mime HTML Format	Es wird eine Webseite in einer einzigen Datei erstellt.
Adobe PDF Format	Es wird eine PDF Datei mit Ihren Berichtsdaten erstellt.
Bitmap	Ihre Berichtsdaten werden in einer Bilddatei im Bitmap-Format gespeichert.
Metafile (EMF)	Ihre Berichtsdaten werden in einer Bilddatei im Windows Metadateiformat gespeichert.
JPEG-Grafik	Ihre Berichtsdaten werden in einer Bilddatei im JPEG-Format gespeichert.
Multi-TIFF-Grafik	Ihre Berichtsdaten werden in einer Bilddatei im Multi-TIFF-Format gespeichert.
TIFF-Grafik	Ihre Berichtsdaten werden in einer Bilddatei im TIFF-Format gespeichert.
Rich Text Format	Ihre Berichtsdaten werden in einem Dokument im Rich Text Format gespeichert.
Nadeldrucker (TTY)	Ihre Berichtsdaten werden für einen Nadeldrucker aufbereitet. Sie können das Ergebnis entweder in eine Datei speichern oder direkt an einen kompatiblen Drucker senden.
Text Format	Ihre Berichtsdaten werden in eine normale, unformatierte Textdatei gespeichert.
Microsoft Excel Format	Es wird eine Microsoft Excel Arbeitsmappe mit Ihren Berichtsdaten erstellt.
XML Format	Es wird eine XML-Datei mit Ihren Berichtsdaten erstellt. Dieses Format eignet sich zum Datenexport in andere Anwendungen.

Je nach gewähltem Ausgabetyp kann das Erscheinungsbild Ihres Berichts abweichen, eventuell sind bestimmte Inhalte im jeweiligen Format auch gar nicht darstellbar (z.B. ein eingebettetes Firmenlogo beim Speichern als Textdatei).

Mit diesem Verfahren müssen Sie für jedoch jeden Ausdruck den Verwaltungsdialog für List & Label Berichte öffnen. Viel bequemer ist daher das folgende Vorgehen: Wählen Sie zuerst den gewünschten Bericht im Navigator des Hauptfensters aus. Danach können Sie die gleiche Funktion auf drei verschiedene Arten starten:

1. Öffnen Sie das Kontextmenü auf dem entsprechenden Navigatoreintrag und wählen Sie dort „Bericht“ | „List & Label Bericht drucken“.
2. Klicken Sie im Hauptmenü unter „Bericht“ auf „List & Label Bericht drucken“.
3. Öffnen Sie die Übersichtsdarstellung des Berichts und klicken Sie dort auf „List & Label Bericht drucken“.

Jede der drei Methoden ist mit einem Drucker-Symbol versehen und führt zum gleichen Ergebnis. Wurde Ihrem ensochemLab Bericht nur ein List & Label Bericht zugeordnet, wird sofort der oben beschriebene Druckdialog geöffnet. Existieren mehrere List & Label Berichte, erhalten Sie ein Auswahlfenster. Dabei ist es unerheblich, ob die Datensätze von Ihnen oder von einem anderen Benutzer (öffentliche und administrative Berichte) angelegt wurden.

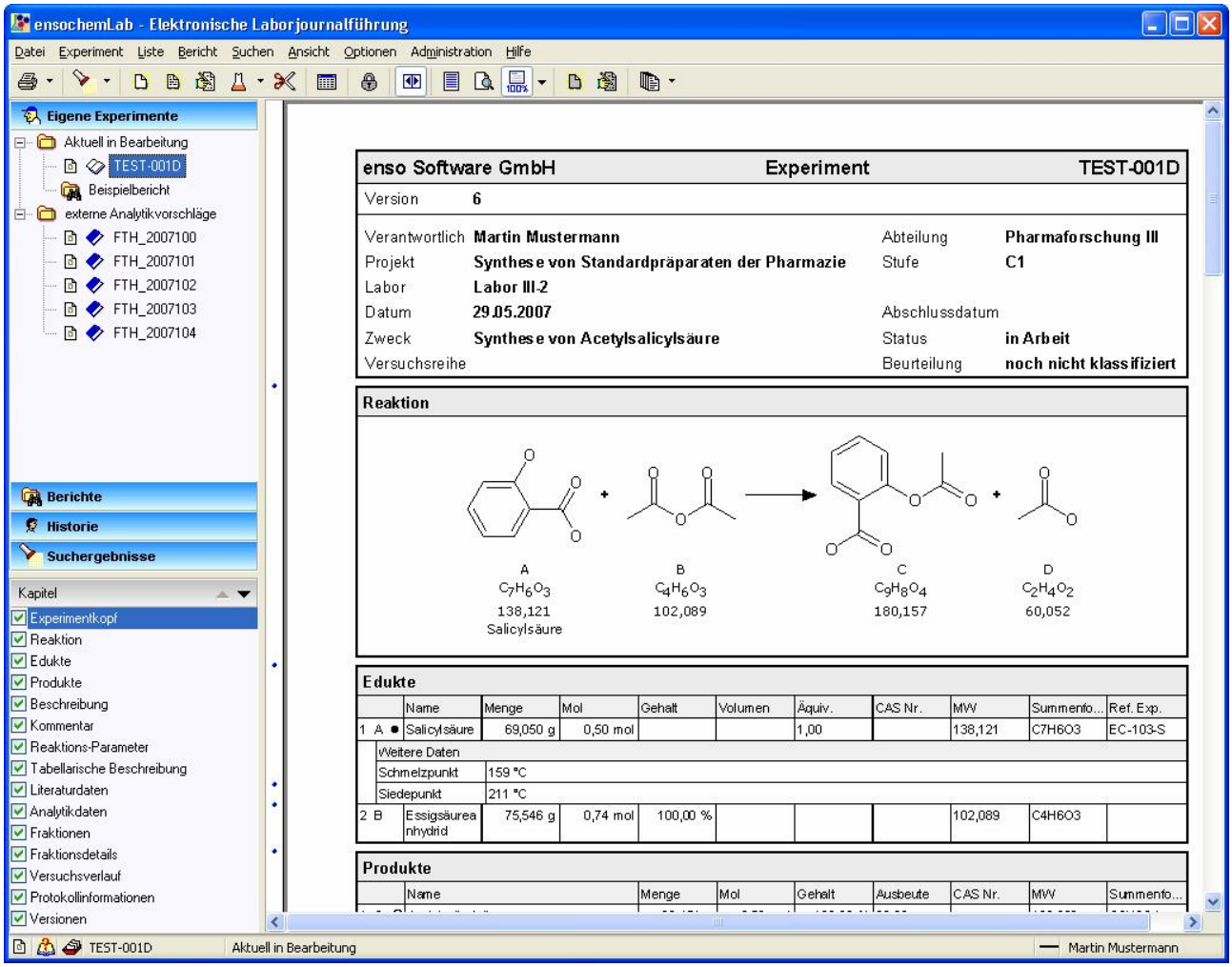

List & Label Berichte
Bitt wählen Sie einen Bericht aus und klicken Sie anschließend auf "Drucken", um den Druckdialog zu öffnen, wo Sie entweder einen Zieldrucker oder einen Dateityp für den Export angeben können. Alternativ dazu können Sie auch auf einem Eintrag doppelklicken.
Mit einem Klick auf "Vorschau" sehen Sie Ihren Bericht im Vorschaudialog.
Name
Benutzername
Projektstatusbericht
Martin Mustermann
Quartalsbericht 3. Quartal
Martin Mustermann
Beschreibung
Übersicht über alle durchgeführten Reaktionen mit Angabe der zugehörigen Experimentnummer und der verantwortlichen Abteilung
Vorschau
Drucken
Schließen

Der Dialog entspricht im Wesentlichen dem Verwaltungsdialog ohne Bearbeitungsmöglichkeiten. Die Anzeige der verfügbaren Berichte erfolgt gänzlich analog.
Nachdem Sie einen Eintrag ausgewählt haben, können Sie den zugehörigen Bericht entweder mit einem Klick auf „Drucken“ direkt ausdrucken oder mit einem Klick auf „Vorschau“ das ebenfalls bereits bekannte Vorschaufenster anzeigen.
Nach dem Ausdruck bzw. dem Schließen der Vorschau kehren Sie zum Auswahldialog zurück, wo Sie weitere Berichte drucken können. Mit einem Klick auf „Schließen“ schließen Sie ihn und kehren zum Hauptfenster bzw. zum Verwaltungsdialog zurück.

Zusammenfassung:	Mit Berichten können Sie verschiedene Suchanfragen speichern und die zugehörigen Ergebnisse jederzeit aktualisiert in einer benutzerdefinierten Übersichtsliste abrufen. So erhalten Sie mit wenig Aufwand einen Überblick über Ihre Experimente. Mit öffentlichen Berichten stellen Sie Ihre Abfragen anderen Benutzern zur Verfügung.

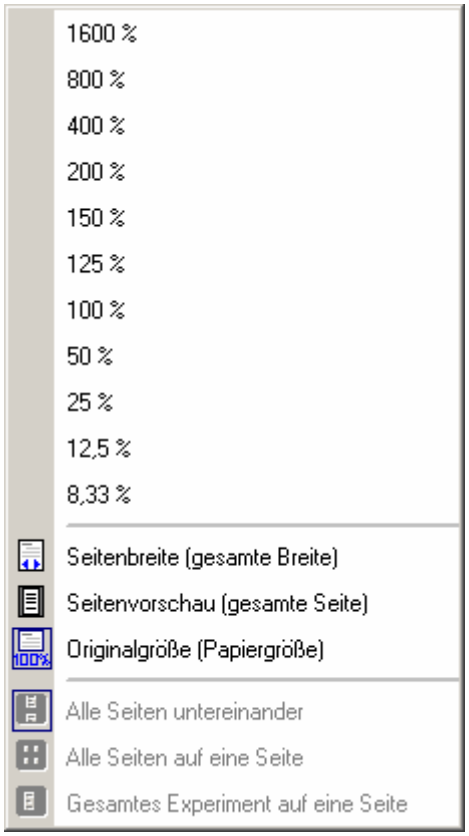
11. Ausdrucke

Klicken Sie auf den Knopf „Druckvorschau“ in der Symbolleiste. Das Programm zeigt das aktuell gewählte Experiment nun als Druckvorschau an:



Dies ist die voreingestellte Druckvorschau auf Originalgröße. Das Dokument wird hierbei exakt in der Größe dargestellt, die es nach dem Ausdruck auf dem Papier haben wird. Binäranhänge an Versuchsbeschreibung, Analytik, etc. werden grundsätzlich auf einer neuen, eigenen Seite im Anhang dargestellt. Ansonsten entspricht die Vorschau genau den in der Standardansicht ausgewählten Daten. Haben Sie einen Block zugeklappt oder gänzlich ausgeblendet, ist er auch in der Druckvorschau entweder nur als Überschrift oder gar nicht sichtbar.

Um den Modus für die Druckvorschau zu wechseln, klappen Sie bitte das entsprechende Menü (neben dem Knopf „Druckvorschau“ in der Symbolleiste) auf:



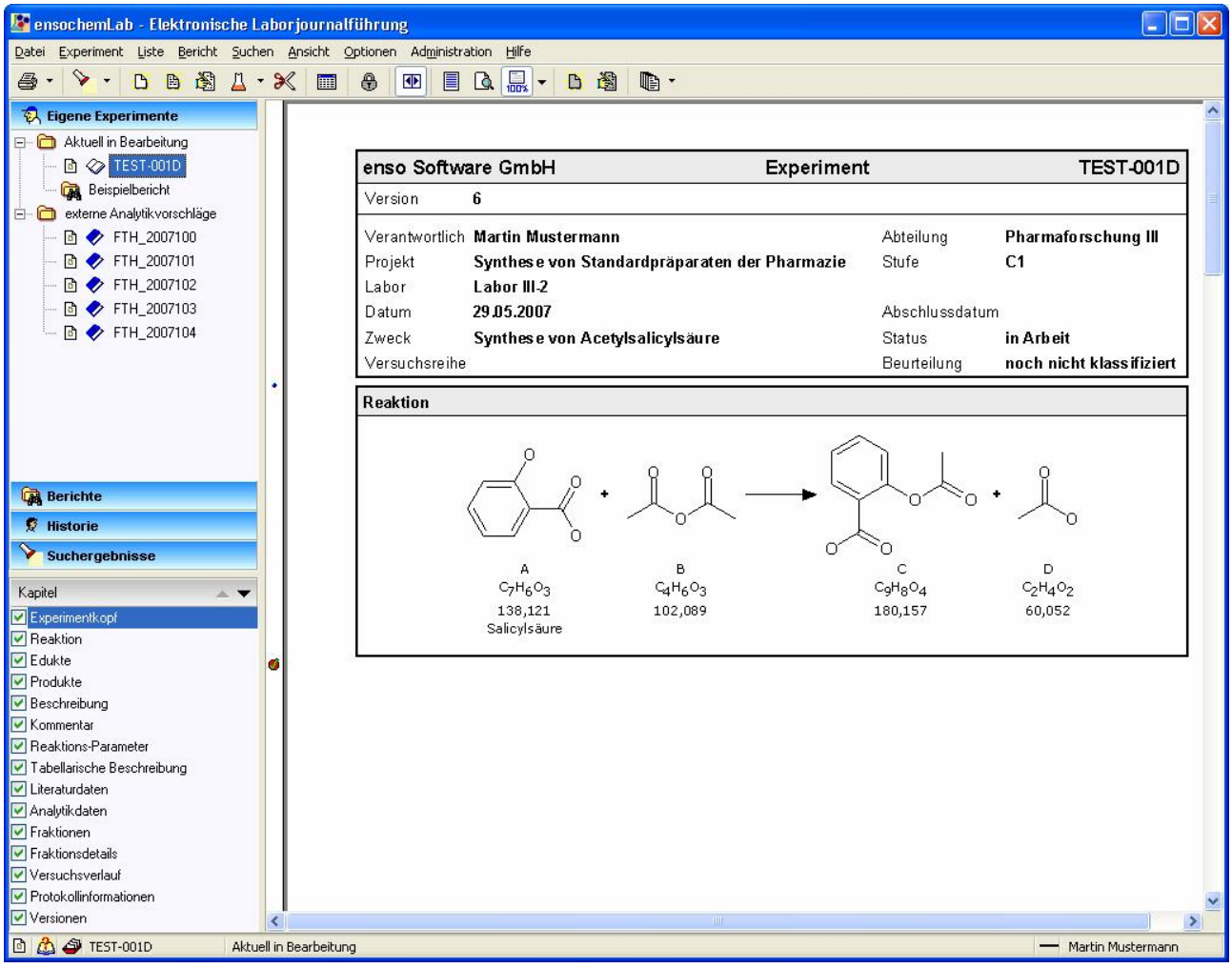
Im oberen Abschnitt können Sie die gewünschte Größe auswählen, in der das Experiment dargestellt werden soll. Bitte beachten Sie jedoch, dass bei der Darstellung von Binärdaten Verzerrungen auftreten können, wenn Bilddateien an die neue Größe angepasst werden.
Alternativ dazu können Sie auch zwischen drei vordefinierten Anzeigemodi wählen:

1. Die Druckvorschau auf Seitenbreite skaliert das Experiment so, dass eine Seite vollständig in der aktuellen Breite des Hauptfenster dargestellt wird. Sie müssen also nicht mehr horizontal scrollen.
2. Die „Seitenvorschau“ zeigt eine gesamte Seite im Hauptfenster an. Das Experiment wird so gestaucht, dass Sie weder horizontal noch vertikal scrollen müssen.
3. Die Druckvorschau auf Originalgröße ist der weiter oben beschriebene Standardmodus.

Daneben können Sie auch die Seitenverteilung mit Hilfe der Auswahlelemente im unteren Bereich bestimmen:

1. Alle Seiten untereinander
   Alle Seiten werden untereinander auf unterschiedlichen Blättern dargestellt. Ein Ausdruck benötigt dementsprechend mehrere Papierseiten.
2. Alle Seiten auf eine Seite
   Alle Seiten werden so verkleinert, dass sie in Spalten auf einem Blatt Papier angeordnet werden können. Der Ausdruck benötigt nur eine Seite.
3. Gesamtes Experiment auf eine Seite
   Das gesamte Experiment wird so verkleinert, dass es fortlaufend auf eine Seite gedruckt werden kann. Es werden somit keine Spalten verwendet und der Ausdruck benötigt nur ein Blatt Papier.

Sie können auch zusätzlich zu den von ensochemLab eingeführten automatischen Seitenumbrüchen manuell eigene Seitenumbrüche definieren. Dies ist generell zwischen zwei Datenblöcken und inner halb der Versuchsbeschreibung möglich. Klicken Sie dazu auf einen der blauen Punkte am linken Seitenrand. Dieser wird nun mit einem roten Kreis mit grünem Haken belegt, um anzuzeigen, dass sich an dieser Stelle ein manueller Umbruch befindet. Ein erneuter Klick auf das Symbol entfernt den Umbruch wieder:



Um Ihr Experiment zu drucken, klicken Sie entweder im Hauptmenü unter „Datei“ auf „Drucken“ oder verwenden Sie den entsprechenden Knopf in der Symbolleiste. ensochemLab erkennt automatisch, ob ein Experiment oder eine Experimentliste gedruckt werden soll. Falls Sie mit dieser automatischen Auswahl nicht einverstanden sind, können Sie das Menü des Druckknopfes aufklappen, wenn Sie auf den kleinen Pfeil rechts neben dem Drucksymbol klicken.

Danach erscheint ein Dialog in dem Sie Ihren Drucker auswählen und weitere Angaben zum Papierformat oder zur Anzahl der Exemplare Ihres Ausdrucks machen können.

Übrigens, wenn Sie mehr Platz für Ihr Experiment benötigen, so können Sie den Navigator ausblenden. Klicken Sie dazu auf den Knopf mit dem Doppelpfeil in der Symbolleiste

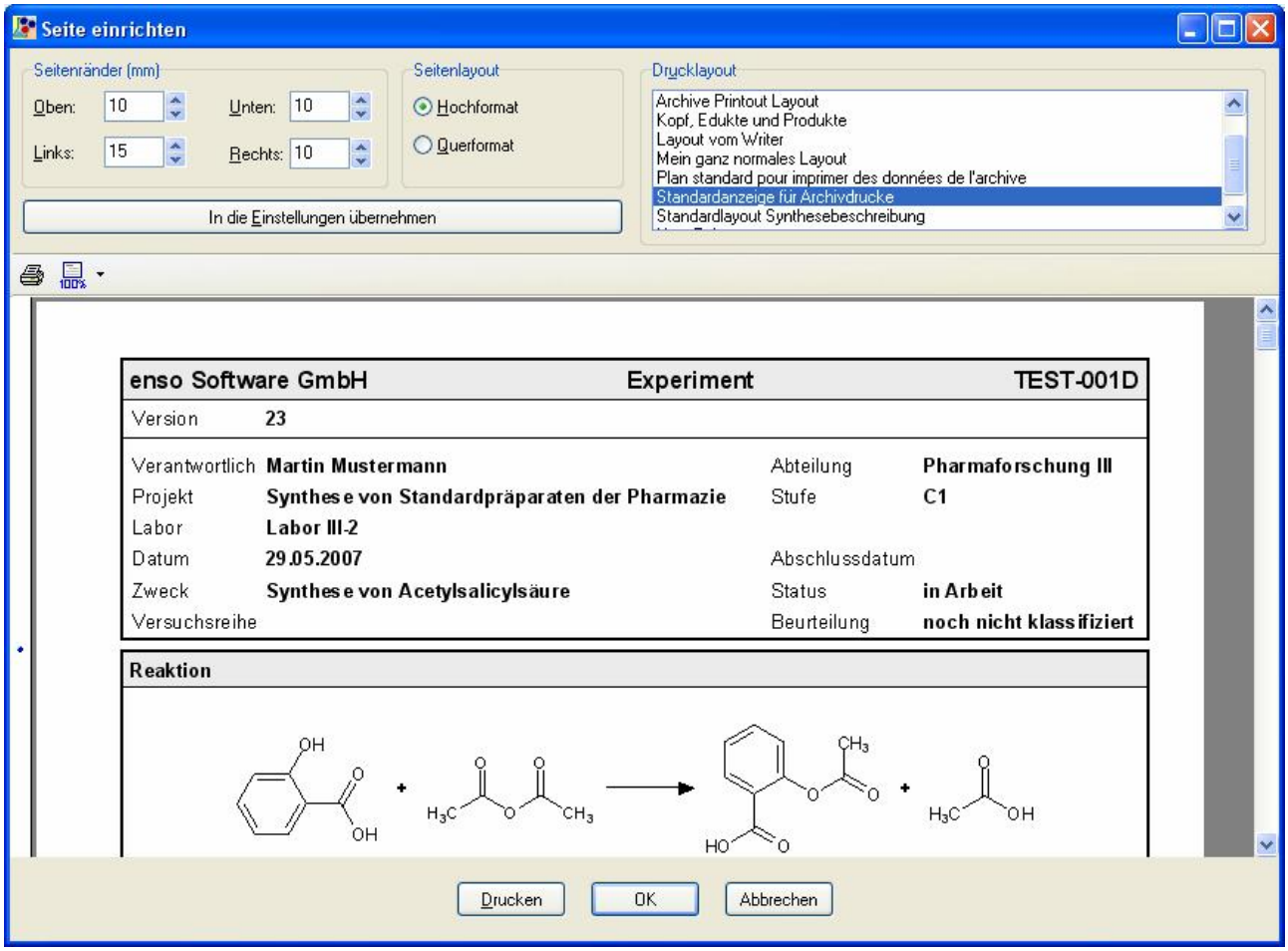
Wie Sie gesehen haben, können Sie in der Normalansicht die Anzeige verändern, indem Sie zum Beispiel Edukte und Produkte neben- oder untereinander anzeigen, die eingeblendeten Spalten variieren oder Spaltenbreiten verändern. In der Druckvorschau sehen Sie hingegen die Seite, wie sie später nach dem Ausdruck auf dem Papier erscheinen wird. Möchten Sie jedoch die ausgedruckte Seite anpassen, benötigen Sie einen Modus, der beide Elemente kombiniert. Ein ständiger Wechsel zwischen einer Bearbeitung in der Normalansicht und einer Kontrolle in der Druckvorschau wäre dabei sehr unpraktisch.

Aus diesem Grund kann ensochemLab das gesamte Experiment in der Größe einer Papierseite anzeigen, wenn Sie auf den entsprechenden Knopf in der Symbolleiste klicken. Hier stehen Ihnen alle Funktionen der Normalansicht zur Verfügung, das Experiment wird jedoch bereits an das Papier angepasst.

Drucklayouts verwenden

ensochemLab bietet Ihnen weiterhin die Möglichkeit für den Ausdruck gezielt ein Layout auszuwählen ohne die aktuellen Anzeigeeinstellungen verändern zu müssen. Je nach Einsatzgebiet der Anwendung können sich bevorzugte, bzw. vorgegebene Layouts unterscheiden. Um dies Ihren Anforderungen entsprechend zu konfigurieren, können Sie entweder die Benutzereinstellungen für den Ausdruck anpassen und ein bevorzugtes Drucklayout wählen oder Sie klicken im Hauptmenü unter „Datei“ auf „Seite einrichten“.

Im Falle eines per Einstellungen ausgewählten Drucklayouts erfolgt die Anzeige des „Seite einrichten“ Dialoges auch beim Klick auf den Drucken-Knopf am oberen Fensterrand um z.B. gezielt Seitenumbrüche zu bestimmen.



Die verfügbaren Funktionen, bzw. Vorgehensweise um den tatsächlichen Ausdruck zu definieren entspricht denen der zuvor beschriebenen „Druckvorschau“ im Hauptfenster. Sollen die von Ihnen vorgenommenen Einstellungen bzgl. Layout und Seitenrändern für später folgende Ausdrucke in Ihre Benutzereinstellungen übernommen werden, nutzen Sie bitte einfach die Schaltfläche „In die Einstellungen übernehmen".

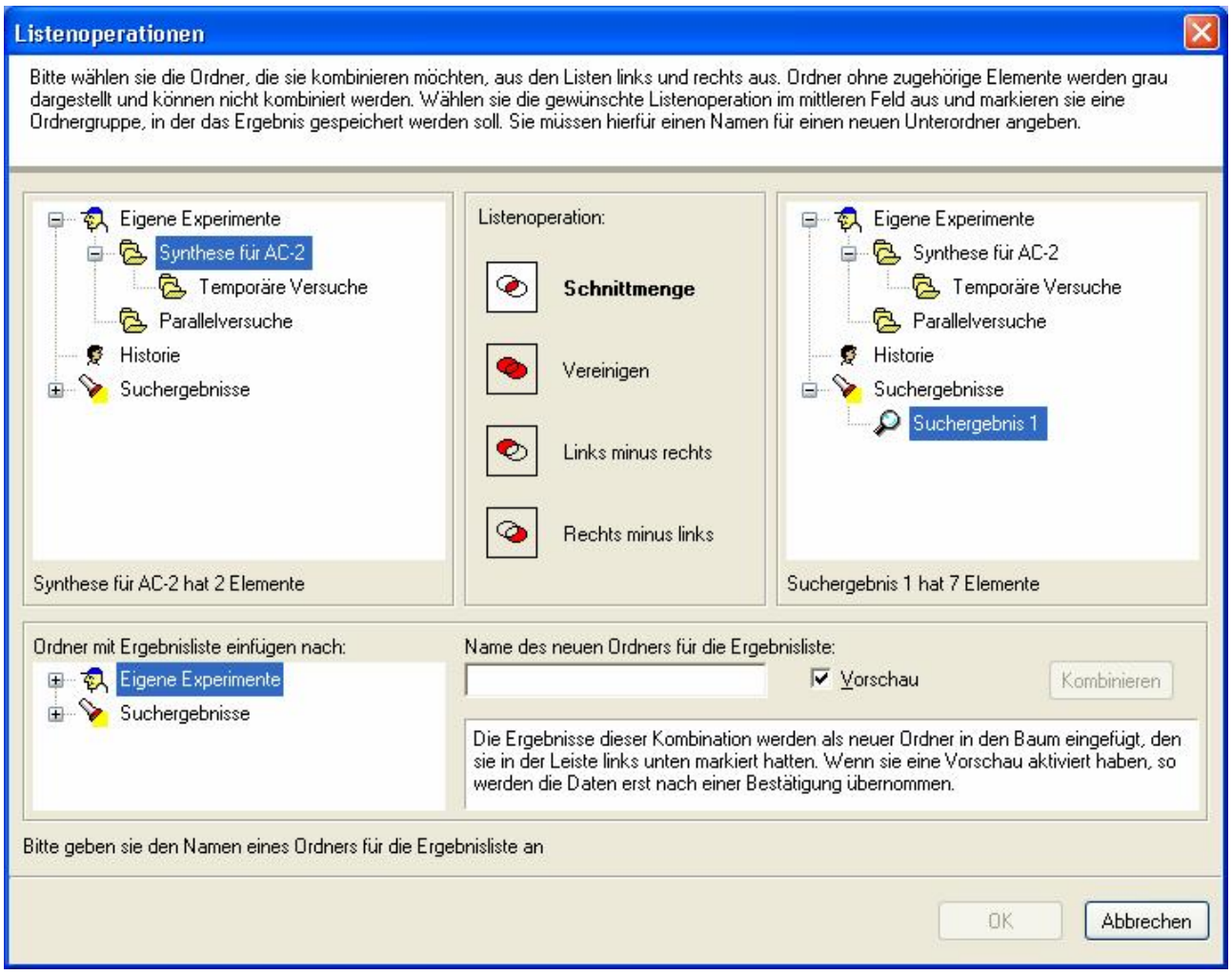
Zusammenfassung:	ensochemLab bietet Ihnen verschiedene Druckvorschauen, damit Sie den zu erwartenden Ausdruck überprüfen können. Klicken Sie auf „Drucken“, um tatsächlich zu drucken.

12. Listenoperationen

Wir haben in früheren Kapiteln bereits die Verwendung von Listen besprochen. Jedoch waren diese Funktionen bei größeren Datenmengen an Experimenten und Ordnern nicht sehr effizient und komfortabel, besonders bei Ordnerstrukturen.
Deshalb wenden wir uns nun ensochemLabs Listenfunktionen zu.

Um die in diesem Kapitel vorgestellten Schritte durchführen zu können, sollten Sie bereits mindestens 5 Experimente in Ihrer Datenbank haben, die in eine Reihe von Ordnern unterteilt sein sollten.

Die Funktion finden Sie im Hauptmenü unter „Liste“. Klicken Sie auf „Listenoperationen…“. Das folgende Fenster erscheint:


Listenoperationen
Bitte wählen sie die Ordner, die sie kombinieren möchten, aus den Listen links und rechts aus. Ordner ohne zugehörige Elemente werden grau dargestellt und können nicht kombiniert werden. Wählen sie die gewünschte Listenoperation im mittleren Feld aus und markieren sie eine Ordnergruppe, in der das Ergebnis gespeichert werden soll. Sie müssen hierfür einen Namen für einen neuen Unterordner angeben.
Eigene Experimente
Synthese für AC-2
Temporäre Versuche
Parallelversuche
Historie
Suchergebnisse
Listenoperation:
Schnittmenge
Vereinigen
Links minus rechts
Rechts minus links
Eigene Experimente
Synthese für AC-2
Temporäre Versuche
Parallelversuche
Historie
Suchergebnisse
Suchergebnis 1
Synthese für AC-2 hat 2 Elemente
Suchergebnis 1 hat 7 Elemente
Ordner mit Ergebnisliste einfügen nach:
Eigene Experimente
Suchergebnisse
Name des neuen Ordners für die Ergebnisliste:
Vorschau
Kombinieren
Die Ergebnisse dieser Kombination werden als neuer Ordner in den Baum eingefügt, den sie in der Leiste links unten markiert hatten. Wenn sie eine Vorschau aktiviert haben, so werden die Daten erst nach einer Bestätigung übernommen.
Bitte geben sie den Namen eines Ordners für die Ergebnisliste an
OK
Abbrechen

Die Felder auf der rechten und linken Seite des Fensters zeigen Ihre Ordnerstruktur. Dies beinhaltet die Ordner „Eigene Experimente“, „Historie“ und „Suchergebnisse“. Wählen Sie auf der linken Seite Ihren ersten Ordner. Gehen Sie dann weiter zur rechten Seite und wählen Sie einen zweiten Ordner. Bitte beachten Sie, dass Sie keinen Ordner doppelt wählen können. Die Reihenfolge der gewählten Einträge (welcher rechts und welcher links gewählt werden muss) hängt von Ihrer Listenfunktion ab. Wir werden später noch genauer darüber sprechen.

Wählen Sie nun den Ordner, in dem Ihre Experimente gespeichert werden sollen. Markieren Sie dazu bitte zuerst einen Überordner auf der unteren linken Seite und geben Sie danach den Namen eines neuen Unterordners an, der von ensochemLab erstellt werden soll. Bitte beachten Sie, dass Unterordner unter „Suchergebnisse“ beim Beenden des Programms gelöscht werden! Der Ordner „Historie“ ist schreibgeschützt und steht somit nicht zur Verfügung.

Nun ist es an der Zeit, die Listenfunktion zu wählen. Um dies zu tun, klicken Sie einfach auf einen Eintrag in der Mitte des Fensters. Der jeweils gewählte Eintrag wird weiß hinterlegt. Die Funktionen sind:

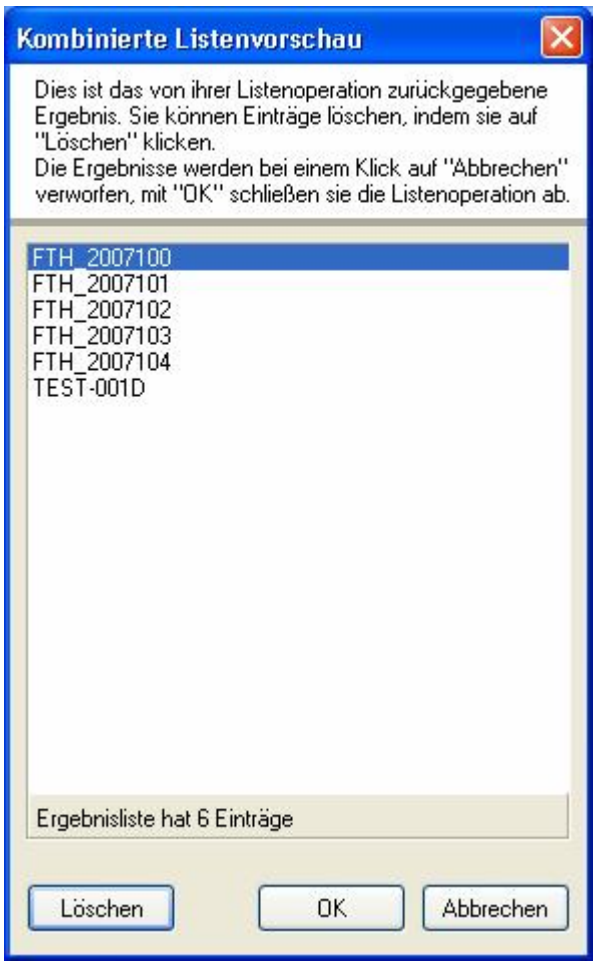
Schnittmenge	Alle Experimente, die in beiden Listen (rechts und links) enthalten sind, werden in den Ergebnisordner eingefügt. Experimente, die nur in einem der Ordner vorhanden sind, werden ignoriert.
Vereinigen	Alle Experimente aus der rechten und der linken Liste werden in den Ergebnisorder übernommen, unabhängig davon, ob sie nur in einer oder in beiden Listen existieren. Dabei wird jedes Experiment jedoch nur einmal hinzugefügt, Duplikate werden ausgefiltert.
Links minus rechts	Es werden alle Experimente aus der linken Liste in den Ergebnisordner eingefügt, die nicht auch in der rechten Liste enthalten sind.
Rechts minus links	Es werden alle Experimente aus der rechten Liste in den Ergebnisordner eingefügt, die nicht auch in der linken Liste enthalten sind.

Bei den Funktionen „Schnittmenge“ und „Vereinigen“ ist die Reihenfolge der gewählten Quellordner egal. Wenn Sie „Links minus rechts“ oder „Rechts minus links“ auswählen, ist es jedoch sehr wichtig!

Nachdem Sie Ihre Auswahl getroffen haben, müssen Sie sich entscheiden ob Sie eine Vorschau der Ergebnisliste wünschen. Dies ermöglicht Ihnen Änderungen an der Liste, bevor sie tatsächlich gespeichert wird. Genauer: Sie können Einträge löschen, die nicht enthalten sein sollten. Klicken Sie danach auf „Kombinieren“.

Dieses Handbuch wird mit der „Vorschau“ Funktion fortfahren. Sollten Sie diese Funktion nicht ausgewählt haben, sehen Sie das folgende Fenster nicht, danach wird jedoch alles in derselben Art und Weise weitergeführt.

Sehen wir uns nun das Vorschau-Fenster an:



Um Ihre Liste ohne Änderungen zu akzeptieren, klicken Sie einfach auf „OK“. Wenn Sie zum Listenoperations-Dialog zurückkehren möchten, um Ihre Anfrage abzuändern oder die gesamte Operation abzubrechen, klicken Sie auf „Abbrechen“.

Wenn Sie einen Eintrag aus der Liste entfernen möchten, wählen Sie ihn bitte aus und klicken Sie danach auf „Löschen“. Bitte beachten Sie, dass dies keine Auswirkungen auf das Experiment selbst oder die Referenzen in den Ursprungsordnern hat.
Sie sollten jedoch mindestens einen Eintrag in der Liste beibehalten, da ensochemLab dies beim Verlassen des Dialoges sonst als Abbruch wertet, auch wenn Sie auf „OK“ geklickt haben.

Wie Sie sicherlich festgestellt haben, können die Listenoperationen nicht dazu verwendet werden, Experimente, die noch in keiner Liste enthalten sind, zu verwalten. Um ein Experiment erstmalig in eine Liste aufzunehmen, steht im Kontextmenü des Navigators der Befehl „Neu“ zur Verfügung. Er wird in Kapitel 5 („Das Hauptfenster“) näher beschrieben.

Zusammenfassung:	Die Listenoperationen ermöglichen Ihnen, Ordnerstrukturen bequem und einfach mit Hilfe logischer Operationen zu verwalten und in einen neuen Zielordner zu übertragen. Verwenden Sie diese Funktion, um Ihre Experimente zu organisieren.

13. Arbeiten mit Experimentlisten

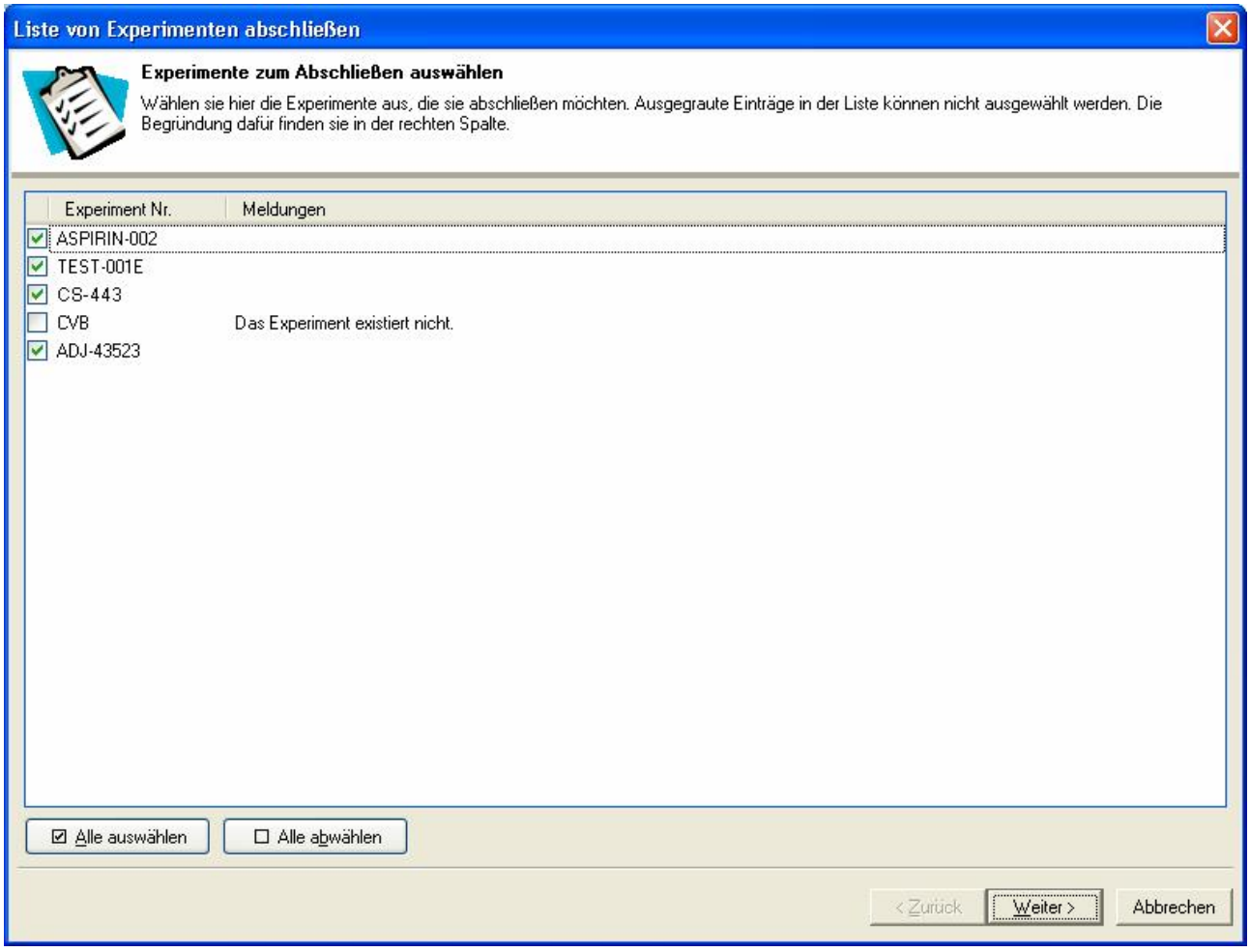
Im vorigen Kapitel haben Sie gesehen, wie Sie mehrere einzelne Experimente oder auch Experimentlisten kombinieren und trennen – also kurz: verwalten – können. Nun haben sich diese Funktionen aber auf den Erhalt einer neuen Liste beschränkt, die Experimente wurden dabei nicht verändert. Eventuell ist aber gerade eine Änderung einiger Kopfdaten wie zum Beispiel der Besitzer oder der Status für sehr viele Experimente notwendig. Dies kann unter anderem bei einer automatisch durchgeführten Versuchsreihe der Fall sein. Auch für diese Fälle bietet ensochemLab komfortable Möglichkeiten.

Für alle Operationen gilt: Befinden sich nicht alle Experimente in einem Ordner (Unterordner werden automatisch mit erfasst), sollten Sie zuerst die Listenoperationen aus dem vorherigen Kapitel mit der Funktion „Zusammenfassen“ verwenden.

13.1. Experimentliste abschließen

Ist eine ganze Versuchsreihe von einer Laboreinrichtung automatisch durchgeführt worden oder wird ein in mehreren Experimenten leicht unterschiedlich verfolgter Ansatz eingestellt, müssen ganze Listen von Experimenten abgeschlossen werden.

Die entsprechende Funktion finden Sie nach der Auswahl eines Ordners im Navigator im Hauptmenü unter „Experiment | Experimentliste abschließen“. ensochemLab öffnet nun das folgende Fenster:



Auf der ersten Seite des Assistenten können Sie die abzuschließenden Experimente auswählen. Die Liste enthält sämtliche Experimente aus dem aktuellen Ordner sowie den Unterordnern.

Um fortzufahren müssen Sie mindestens einen Eintrag anwählen.

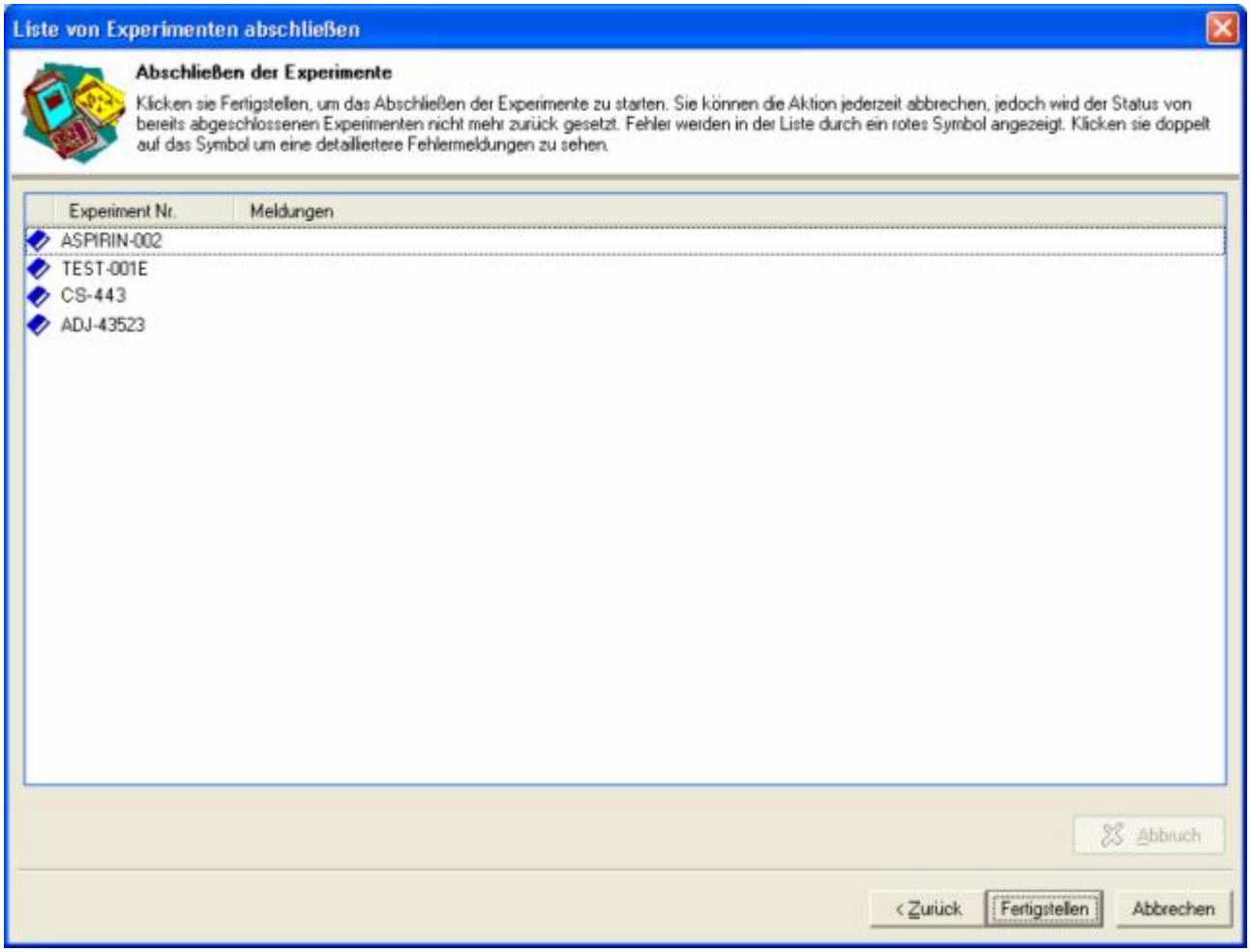
Mit den beiden Knöpfen links unterhalb der Experimentliste können Sie alle Listeneinträge auf einmal an.- oder abwählen.

Klicken Sie anschließend auf „Weiter“, um zur nächsten Seite zu gelangen.

Hier sehen Sie noch einmal die Liste Ihrer Experimente, jedoch hat das Programm nun bereits diejenigen Einträge ausgefiltert, bei denen ein Abschließen definitiv nicht möglich sein kann. Das bedeutet nicht, dass später keine Fehler mehr auftreten können. So können Kollegen eines oder mehrere Ihrer Experimente eventuell in der Zwischenzeit noch einmal ändern oder löschen.

Klicken Sie nach einer letzten Prüfung der Experimentliste auf „Fertigstellen“. ensochemLab arbeitet die Liste nun von oben nach unten ab. Am Symbol des aufgeschlagenen Buchs erkennen Sie das aktuell verarbeitete Experiment. Ein grüner Haken markiert einen erfolgreichen Abschluss, ein Buch mit einem roten X kennzeichnet einen Fehler. Die Begründung für den Fehlschlag finden Sie in solch einem Fall in de rechten Spalte der Tabelle.

Während der Vorgang ausgeführt wird sehen Sie am unteren Rand der Liste einen Fortschrittsbalken sowie einen „Abbruch“ Knopf, mit dem Sie das Abschließen jederzeit abbrechen können. Bitte beachten Sie hierbei jedoch, dass bereits verarbeitete Experimente nicht zurückgesetzt werden.


Liste von Experimenten abschließen
Abschließen der Experimente
Klicken sie Fertigstellen, um das Abschließen der Experimente zu starten. Sie können die Aktion jederzeit abbrechen, jedoch wird der Status von bereits abgeschlossenen Experimenten nicht mehr zurück gesetzt. Fehler werden in der Liste durch ein rotes Symbol angezeigt. Klicken sie doppelt auf das Symbol um eine detailliertere Fehlermeldungen zu sehen.
Experiment Nr.
Meldungen
ASPIRIN-002
TEST-001E
CS-443
ADJ-43523
Abbruch
< Zurück
Fertigstellen
Abbrechen

Nach Abschluss der Gesamtoperation sehen Sie anstelle des Fortschrittsanzeigers einen zusammenfassenden Text (Anzahl der verarbeiteten und Anzahl der fehlgeschlagenen Experimente).

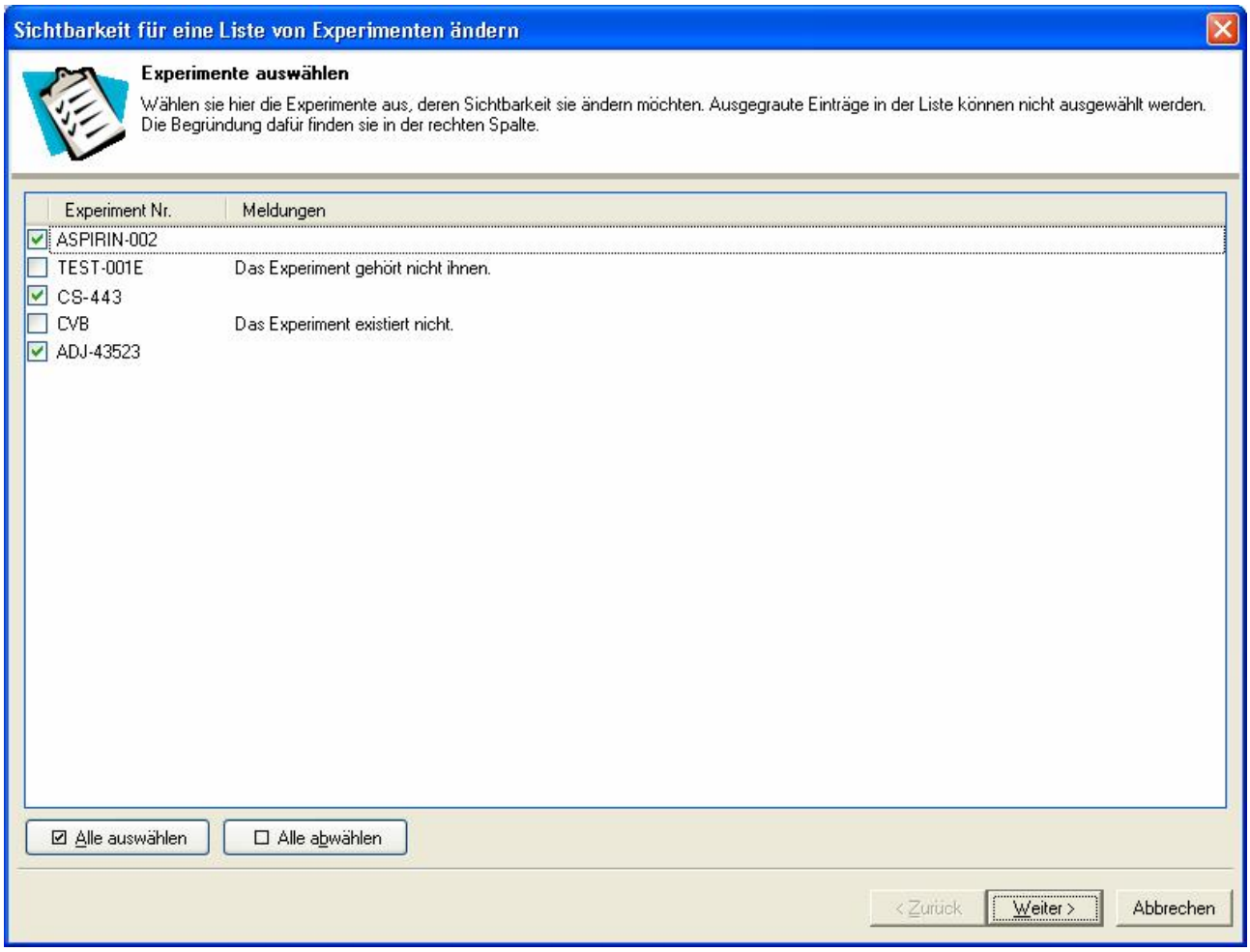
Klicken Sie dann bitte auf „Schließen“, um zum Hauptfenster zurückzukehren.

13.2. Sichtbarkeit einer Experimentliste ändern

Diese Funktion steht nur zur Verfügung, wenn Sie die Standardbenutzerverwaltung verwenden. Für nähere Informationen kontaktieren Sie bitte Ihren Administrator oder Betreuer.

Wenn die Richtlinien für die Sichtbarkeit von Experimenten in Ihrem Unternehmen geändert werden oder Sie eine Reihe bisher privater Experimente Ihren Kollegen frei schalten möchten, können Sie diese Listenoperation verwenden.

Um das entsprechende Modul zu starten, klicken Sie bitte im Hauptfenster unter „Experiment“ auf „Sichtbarkeit einer Experimentliste ändern“. Das folgende Fenster erscheint:

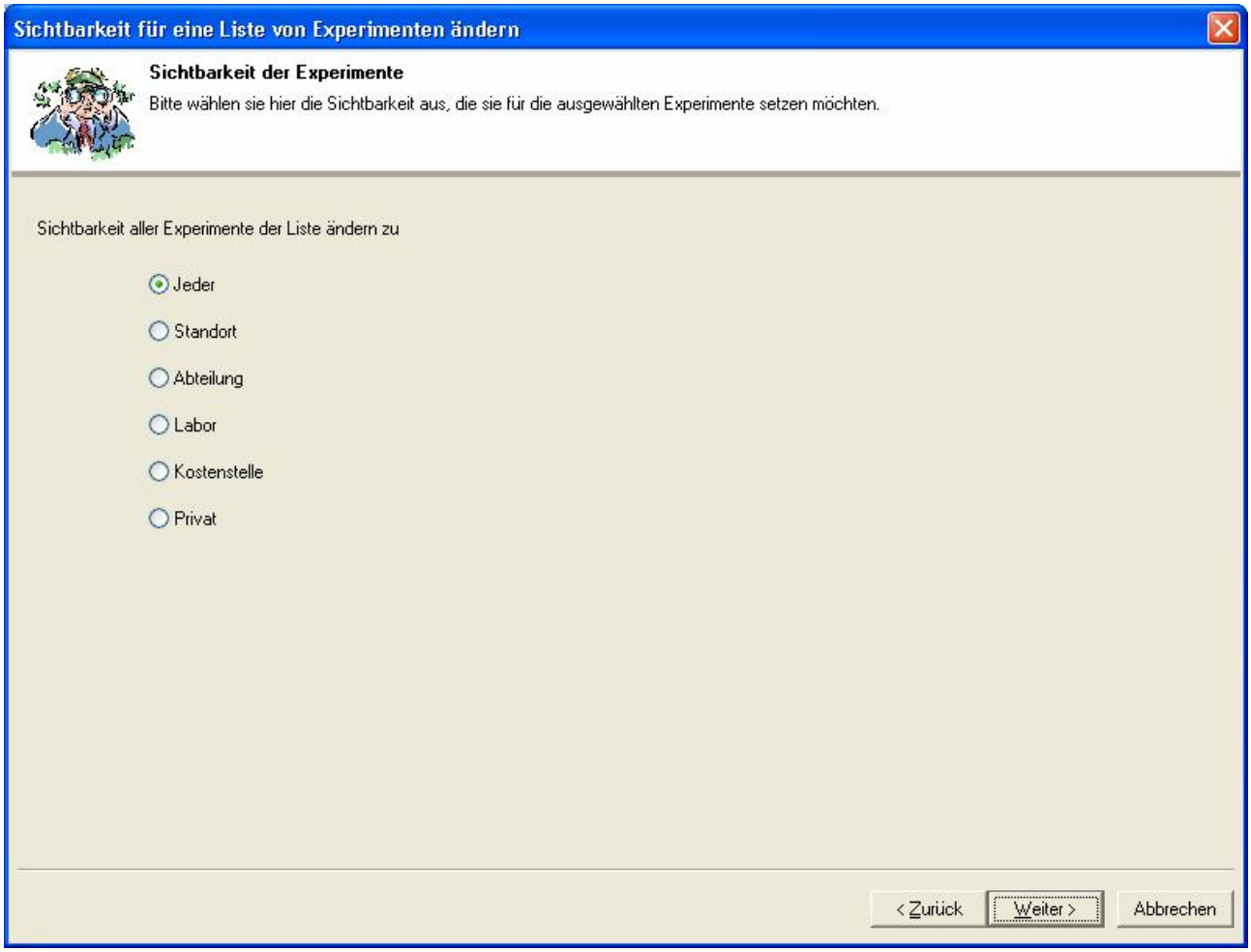

Sichtbarkeit für eine Liste von Experimenten ändern
Experimente auswählen
Wählen sie hier die Experimente aus, deren Sichtbarkeit sie ändern möchten. Ausgegraute Einträge in der Liste können nicht ausgewählt werden. Die Begründung dafür finden sie in der rechten Spalte.
Experiment Nr.
Meldungen
ASPIRIN-002
TEST-001E
Das Experiment gehört nicht ihnen.
CS-443
CVB
Das Experiment existiert nicht.
ADJ-43523
Alle auswählen
Alle abwählen
< Zurück
Weiter >
Abbrechen

Diese Seite stellt genau wie beim Abschließen einer Liste von Experimenten die Einträge Ihrer Experimentliste dar. Die Sichtbarkeit von grau markierten Experimenten kann nicht geändert werden, die Begründung hierfür finden Sie in der zweiten Spalte.

Weitere Informationen zur Experimentauswahl finden Sie in Teil 1 („Experimentliste abschließen“).

Klicken Sie auf „Weiter“, um fortzufahren.

Auf der nächsten Seite müssen Sie nun die neue Sichtbarkeit für alle Experimente angeben. Bitte beachten Sie, dass Sie für alle Experimente die gleiche Sichtbarkeit wählen müssen. Falls Sie unterschiedliche Sichtbarkeiten für Ihre Experimente verwenden möchten, müssen Sie entweder die Einzelfunktion bezogen auf ein Experiment verwenden oder Ihre Listen mit den zuvor besprochenen Listenoperationen aufteilen.

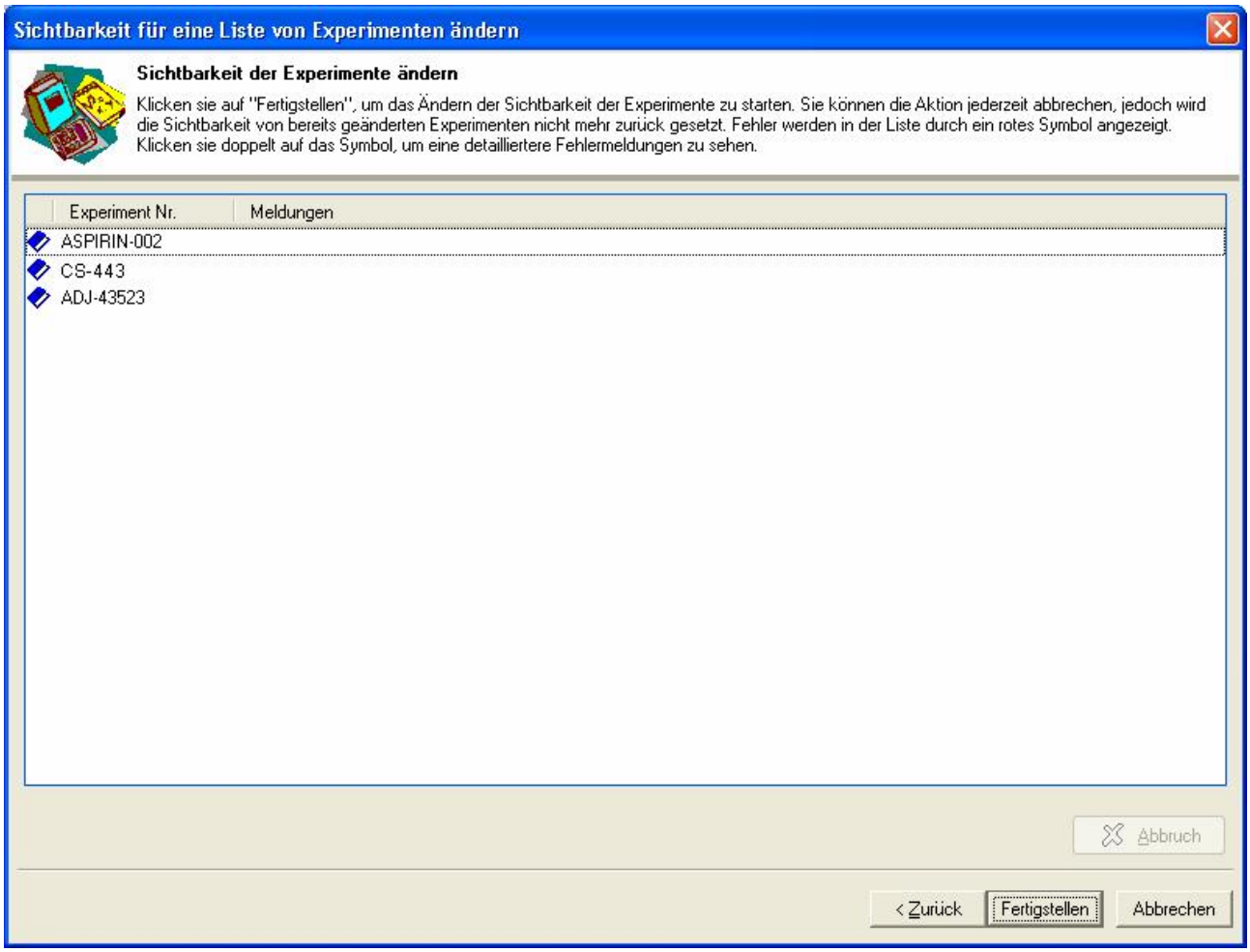


Die Sichtbarkeiten entsprechen exakt den pro Experiment in den Kopfdaten einstellbaren Werten.

Nachdem Sie Ihre Entscheidung getroffen haben, klicken Sie bitte auf „Weiter“.

Auf der letzten Seite dieses Assistenten erhalten Sie nun wieder die vom ersten Teil dieses Kapitels bekannte Ablaufseite. Sie enthält den Teil der Experimentliste, der bearbeitet werden kann und von Ihnen zur Änderung der Sichtbarkeit ausgewählt wurde.

Nach einem Klick auf „Fertigstellen“ können Sie die Abarbeitung der Operation beobachten. Es gelten die in Teil 1 genannten Ergebnissymbole. Die rechte Spalte enthält wie gewohnt die Fehlermeldungen.

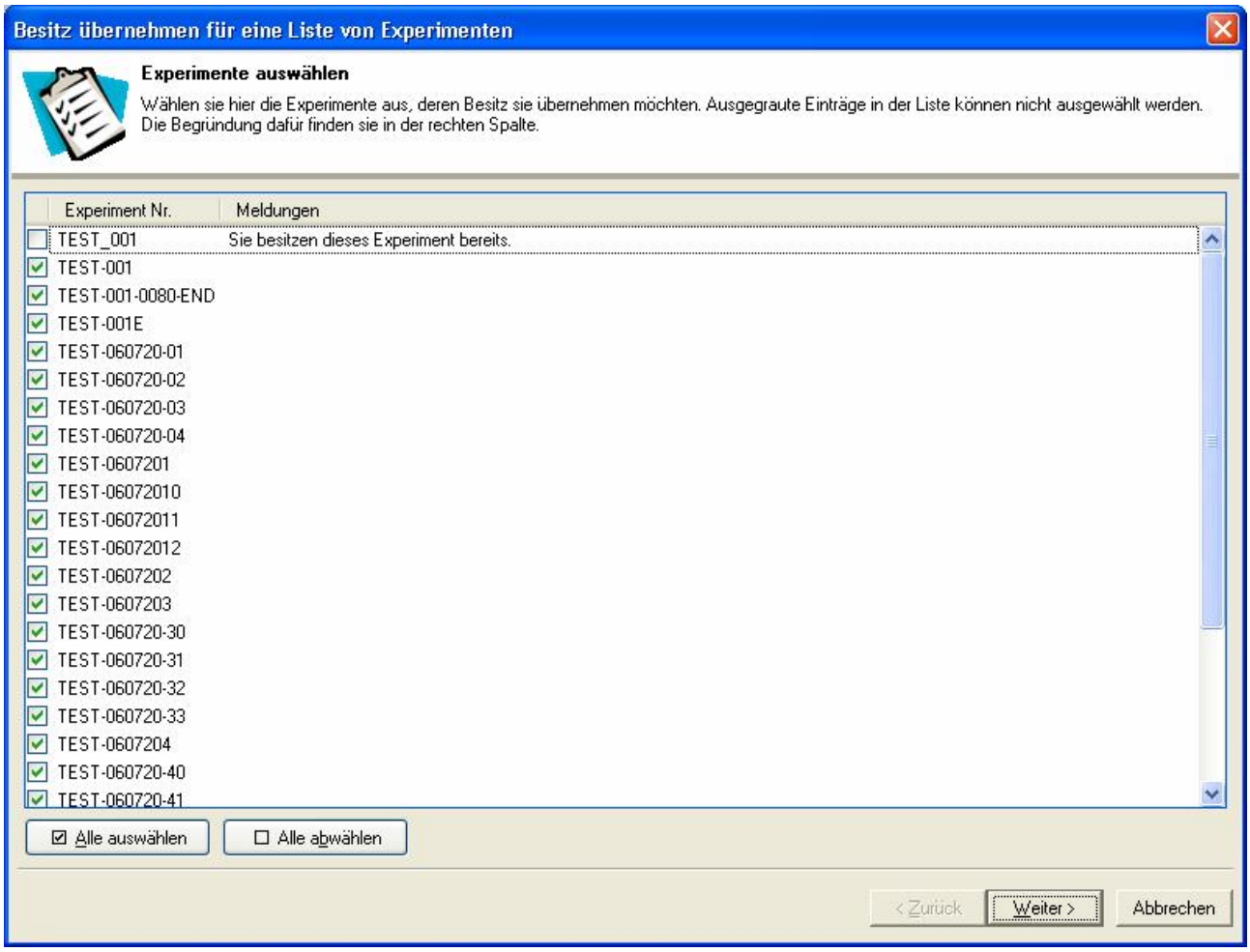

Sichtbarkeit für eine Liste von Experimenten ändern
Sichtbarkeit der Experimente ändern
Klicken sie auf "Fertigstellen", um das Ändern der Sichtbarkeit der Experimente zu starten. Sie können die Aktion jederzeit abbrechen, jedoch wird die Sichtbarkeit von bereits geänderten Experimenten nicht mehr zurück gesetzt. Fehler werden in der Liste durch ein rotes Symbol angezeigt. Klicken sie doppelt auf das Symbol, um eine detailliertere Fehlermeldungen zu sehen.
Experiment Nr.
Meldungen
ASPIRIN-002
CS-443
ADJ-43523
Abbruch
< Zurück
Fertigstellen
Abbrechen

Nach Abschluss der Gesamtoperation können Sie den Dialog mit einem Klick auf „Schließen“ verlassen.

13.3. Liste übernehmen

Wenn ein Kollege aus dem Unternehmen ausscheidet, in einen anderen Bereich wechselt oder durch eine Krankheit seiner Arbeit für längere Zeit nicht nachgehen kann, müssen Kollegen nicht nur lesenden, sondern auch schreibenden Zugriff auf seine Experimente erhalten. Um dies zu ermöglichen, können Sie Besitz an seinen Experimenten übernehmen, sofern der Administrator diese Funktion aktiviert hat.
Auch hier müssen nicht alle Experimente einzeln bearbeitet werden, sondern es besteht eine komfortable Listenoperation.

Das entsprechende Modul kann über den Eintrag „Experiment“ | „Liste übernehmen“ im Hauptmenü gestartet werden. Das folgende Fenster erscheint:



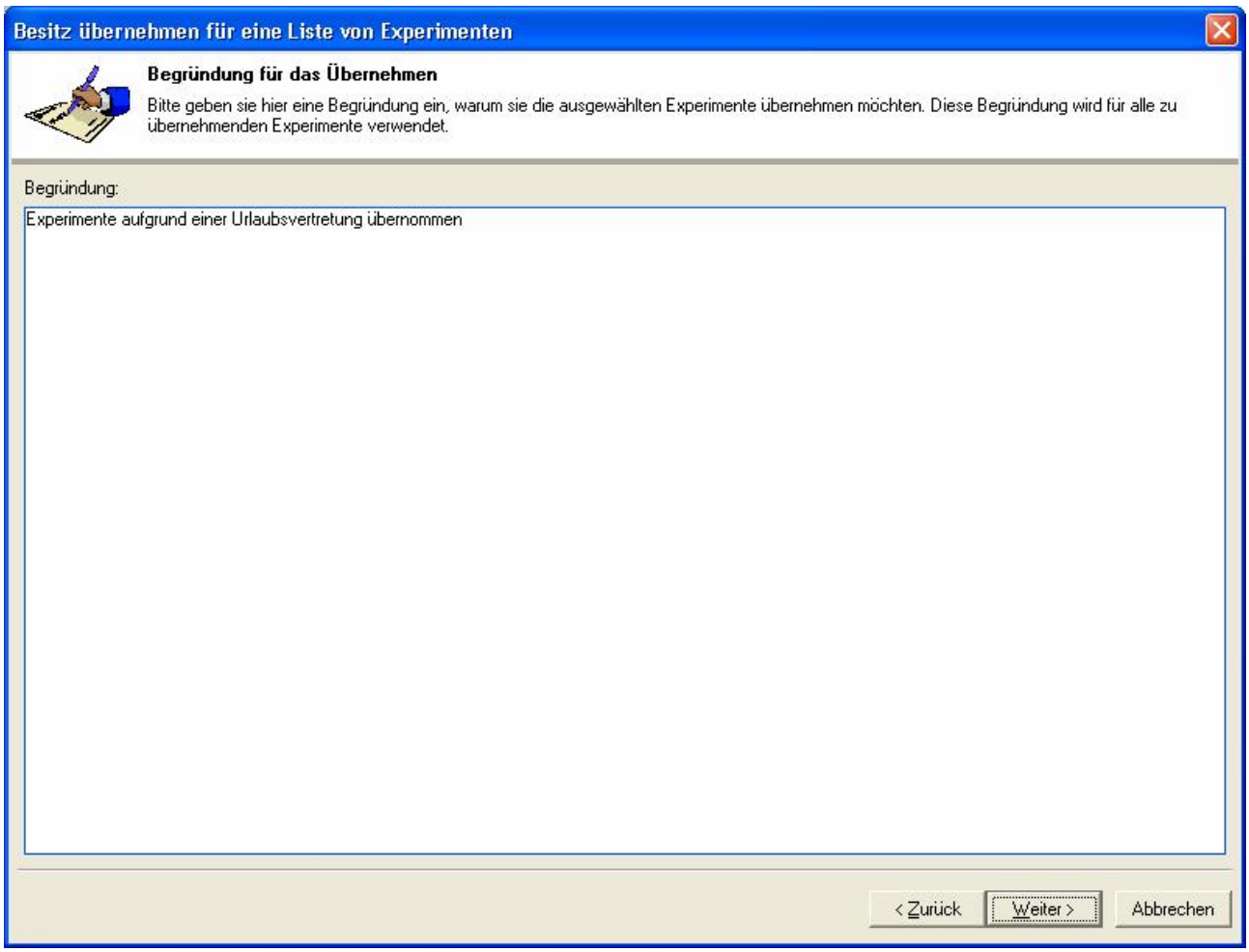
Analog zu den vorher bereits besprochenen Listenoperationen können Sie auch hier auf der ersten Seite die zu bearbeitenden Experimente auswählen. Mit den Knöpfen am unteren Rand des Fensters können Sie alle Experimente in der Liste an- oder abwählen.

Falls ein Experiment nicht übernommen werden kann (z.B. weil es Ihnen bereits gehört), wird es grau hinterlegt. In der rechten Spalte sehen Sie in einem solchen Fall wie üblich die entsprechende Begründung.

Weitere Informationen zur Experimentauswahl finden Sie in Teil 1 („Experimentliste abschließen“).

Klicken Sie auf „Weiter“, um fortzufahren.

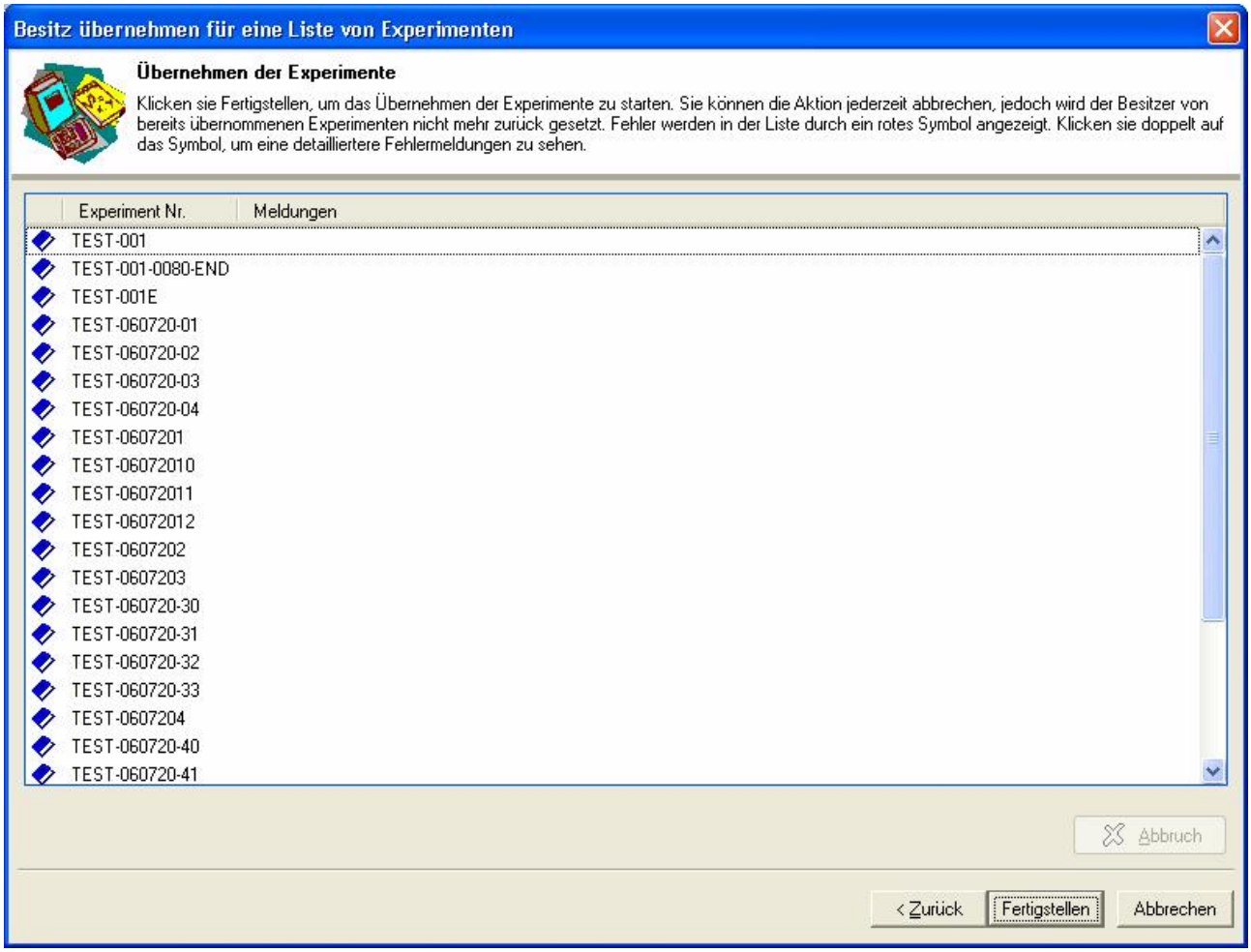
Es erscheint nun die folgende Seite:


Besitz übernehmen für eine Liste von Experimenten
Begründung für das Übernehmen
Bitte geben sie hier eine Begründung ein, warum sie die ausgewählten Experimente übernehmen möchten. Diese Begründung wird für alle zu übernehmenden Experimente verwendet.
Begründung:
Experimente aufgrund einer Urlaubsvertretung übernommen
< Zurück
Weiter >
Abbrechen

Auf dieser Seite müssen Sie eine Begründung eingeben, warum Sie das Experiment übernehmen möchten. Diese Begründung wird in den Protokollinformationen jedes einzelnen Experiments gespeichert.

Klicken Sie danach auf „Weiter“, um fortzufahren.

Bei der letzten Seite in diesem Assistenten handelt es sich wie bei den bereits besprochenen Assistenten auch um die Durchführungsseite, auf der die gewünschte Operation ausgeführt wird.



Nach einem Klick auf „Fertigstellen“ können Sie die Abarbeitung der Operation beobachten. Es gelten die in Teil 1 genannten Ergebnissymbole. Die rechte Spalte enthält wie gewohnt die Fehlermeldungen.

Nachdem alle Experimente übernommen wurden, können Sie mit einem Klick auf „Schließen“ zu ensochemLab zurückkehren.

13.4. Experimentliste weitergeben

Neben der Möglichkeit, dass ein anderer Benutzer Experimente von Ihnen übernimmt, können Sie diese auch aktiv an ihn weitergeben. Dies kann zum Beispiel vor Antritt einer längeren Dienstreise sinnvoll sein, um die Experimente an die Vertretung zu übergeben.

Die entsprechende Funktion finden Sie im Hauptmenü unter „Experiment“ | „Experimentliste weitergeben“. Da ihre Funktionalität und ihre Benutzeroberfläche weitestgehend dem Übernehmen von Experimentlisten entsprechen, gehen wir an dieser Stelle nicht näher darauf ein.

Zusammenfassung:	ensochemLab stellt Ihnen eine Reihe nützlicher Funktionen bereit, mit denen Sie bestimmte Operationen (Besitz übernehmen, Besitz weitergeben, Sichtbarkeit ändern usw.) auf allen Experimenten im aktuellen Ordner ausführen können, ohne jedes Experiment einzeln bearbeiten zu müssen.

14. Arbeiten mit Fraktionen

Fraktionen sind in ensochemLab flexibel angelegt, so dass Sie verschiedene Szenarien dokumentieren können.
Es ist möglich, Proben von Reaktionsverläufen oder verschiedenen Aufarbeitungsschritten zu erfassen. Ebenso ist es möglich, einzelne Chargen einer Synthese zu dokumentieren.

Drei Beispiele zur Dokumentation von Fraktionen sollen dies veranschaulichen. Alle Beispiele basieren auf der Synthese von Acetylsalicylsäure (Das zugehörige Experiment wurde in Kapitel 3 erstellt).

Beispiel A:	Detaillierte Dokumentation des Reaktionsverlaufs mit Hilfe von HPLC-Analytik
Beispiel B:	Vereinfachte Dokumentation der Reinigung von Acetylsalicylsäure
Beispiel C:	Vereinfachte Dokumentation der Trennung von Acetylsalicylsäure vom Nebenprodukt Essigsäure

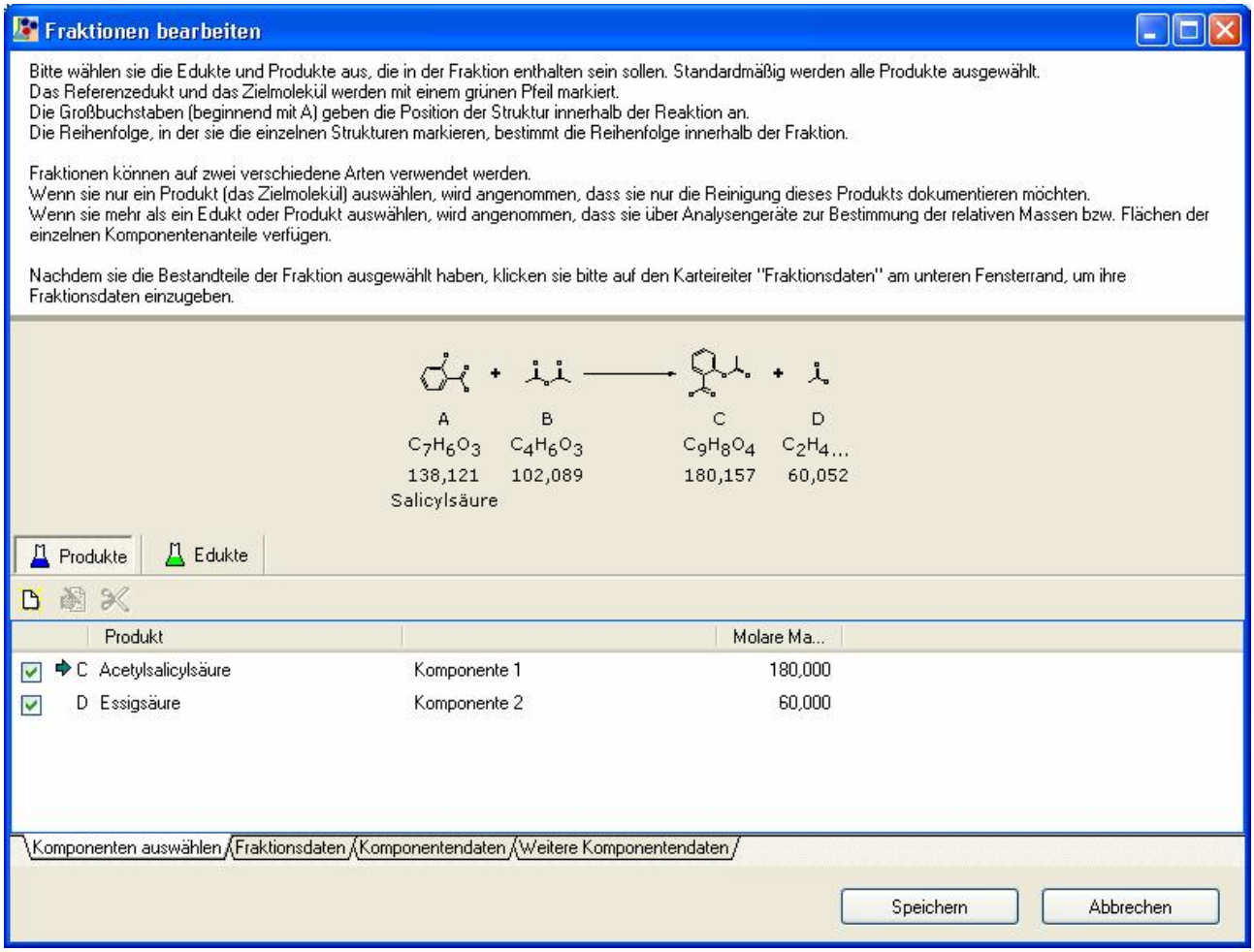
14.1. Beispiel A

Für dieses Beispiel legen Sie am besten ein neues Experiment an, indem Sie das Experiment aus dem Kapitel „Erstellen Sie Ihr erstes Experiment“ zur Darstellung von Acetylsalicylsäure kopieren. Wie Experimentdaten eines vorhandenen Experiments in ein neues Experiment kopiert werden ist im Kapitel „Das Hauptfenster“ beschrieben. Geben Sie einen eindeutigen Namen für das neue Experiment an und speichern Sie es.

Die Mengen der Edukte sind:

Salicylsäure	0,50 mol	69,05 g
Essigsäureanhydrid	0,74 mol	75,21 g

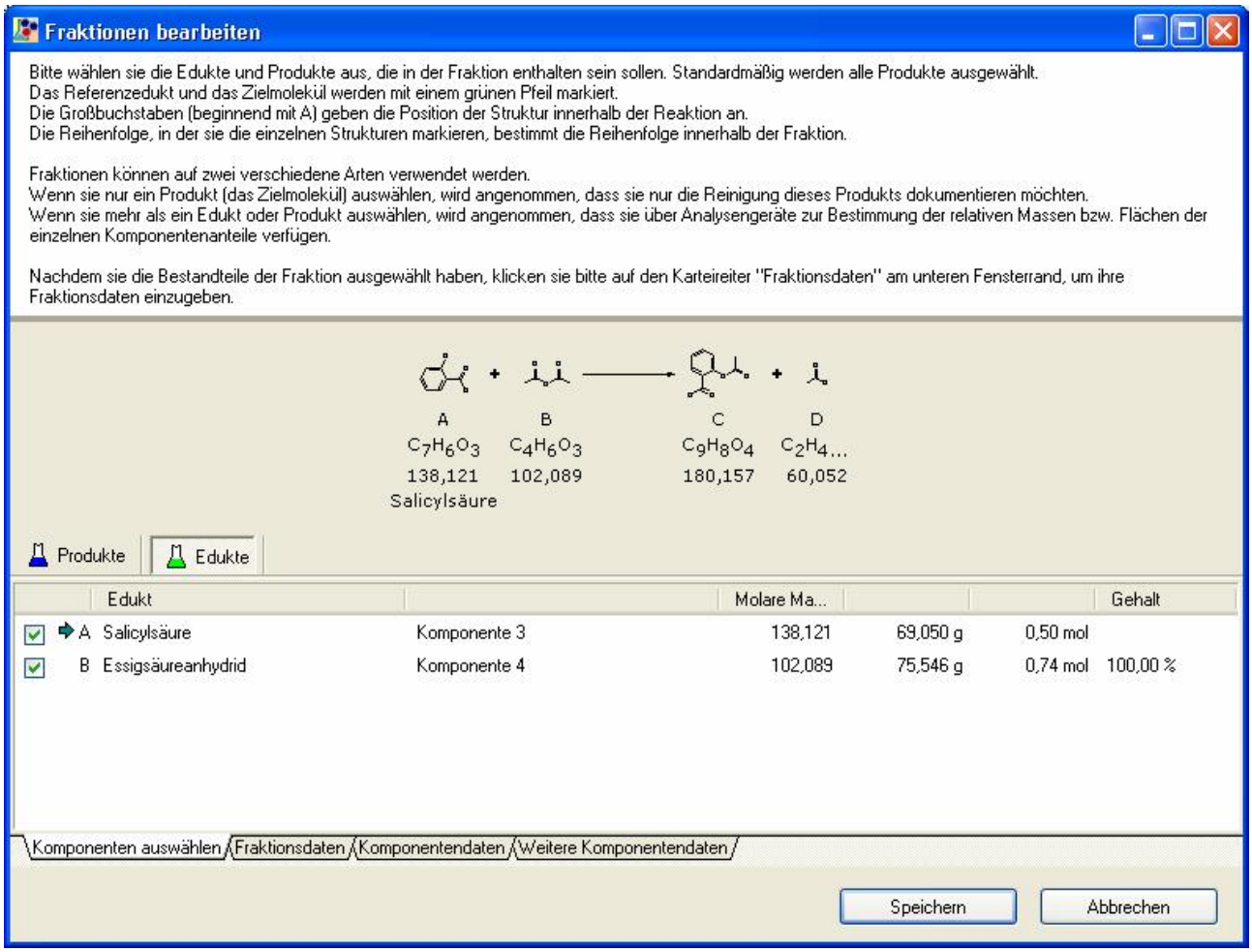
Um Fraktionen zu erstellen, klicken Sie bitte auf den Menüpunkt „Fraktionen bearbeiten“ im Menü „Experiment“ oder wählen Sie den entsprechenden Knopf in der Symbolleiste aus. Das folgende Fenster erscheint:


Fraktionen bearbeiten
Bitte wählen sie die Edukte und Produkte aus, die in der Fraktion enthalten sein sollen. Standardmäßig werden alle Produkte ausgewählt.
Das Referenzedukt und das Zielmolekül werden mit einem grünen Pfeil markiert.
Die Großbuchstaben (beginnend mit A) geben die Position der Struktur innerhalb der Reaktion an.
Die Reihenfolge, in der sie die einzelnen Strukturen markieren, bestimmt die Reihenfolge innerhalb der Fraktion.
Fraktionen können auf zwei verschiedene Arten verwendet werden.
Wenn sie nur ein Produkt (das Zielmolekül) auswählen, wird angenommen, dass sie nur die Reinigung dieses Produkts dokumentieren möchten.
Wenn sie mehr als ein Edukt oder Produkt auswählen, wird angenommen, dass sie über Analysengeräte zur Bestimmung der relativen Massen bzw. Flächen der einzelnen Komponentenanteile verfügen.
Nachdem sie die Bestandteile der Fraktion ausgewählt haben, klicken sie bitte auf den Karteireiter "Fraktionsdaten" am unteren Fensterrand, um ihre Fraktionsdaten einzugeben.
A
C7H6O3
138,121
Salicylsäure
B
C4H6O3
102,089
C
C9H8O4
180,157
D
C2H4...
60,052
Produkte
Edukte
Produkt
Molare Ma...
C Acetylsalicylsäure
Komponente 1
180,000
D Essigsäure
Komponente 2
60,000
Komponenten auswählen
Fraktionsdaten
Komponentendaten
Weitere Komponentendaten
Speichern
Abbrechen

Auf dieser Seite können Sie festlegen, welche Edukte und Produkte in den Fraktionen enthalten sein sollen. Markieren Sie diese Einträge mit einem Haken in der Liste. Als Voreinstellung sind die Produkte ausgewählt. Die erste Spalte der Tabelle zeigt den Namen des jeweiligen Produktes/Edukts an, die zweite Spalte enthält den automatisch generierten Namen der Komponente. In der dritten Spalte finden Sie die Molare Masse. Bei den Edukten werden in zwei weiteren Spalten die Menge, die Molzahl und, falls vorhanden, der Gehalt angezeigt.

Mit dem Schalter an der Oberseite der Liste können Sie zwischen Edukten und Produkten wechseln. Die dort verwendeten Symbole werden im gesamten Fraktionsmodul angezeigt, um den Typ des jeweiligen Moleküls zu kennzeichnen:

- für Produkte
- für Edukte


Fraktionen bearbeiten
Bitte wählen sie die Edukte und Produkte aus, die in der Fraktion enthalten sein sollen. Standardmäßig werden alle Produkte ausgewählt.
Das Referenzedukt und das Zielmolekül werden mit einem grünen Pfeil markiert.
Die Großbuchstaben (beginnend mit A) geben die Position der Struktur innerhalb der Reaktion an.
Die Reihenfolge, in der sie die einzelnen Strukturen markieren, bestimmt die Reihenfolge innerhalb der Fraktion.
Fraktionen können auf zwei verschiedene Arten verwendet werden.
Wenn sie nur ein Produkt (das Zielmolekül) auswählen, wird angenommen, dass sie nur die Reinigung dieses Produkts dokumentieren möchten.
Wenn sie mehr als ein Edukt oder Produkt auswählen, wird angenommen, dass sie über Analysengeräte zur Bestimmung der relativen Massen bzw. Flächen der einzelnen Komponentenanteile verfügen.
Nachdem sie die Bestandteile der Fraktion ausgewählt haben, klicken sie bitte auf den Karteireiter "Fraktionsdaten" am unteren Fensterrand, um ihre Fraktionsdaten einzugeben.
A
B
C
D
C7H6O3
C4H6O3
C9H8O4
C2H4...
138,121
102,089
180,157
60,052
Salicylsäure
Produkte
Edukte
Edukt
Molare Ma...
Gehalt
A Salicylsäure
Komponente 3
138,121
69,050 g
0,50 mol
B Essigsäureanhydrid
Komponente 4
102,089
75,546 g
0,74 mol
100,00 %
Komponenten auswählen
Fraktionsdaten
Komponentendaten
Weitere Komponentendaten
Speichern
Abbrechen

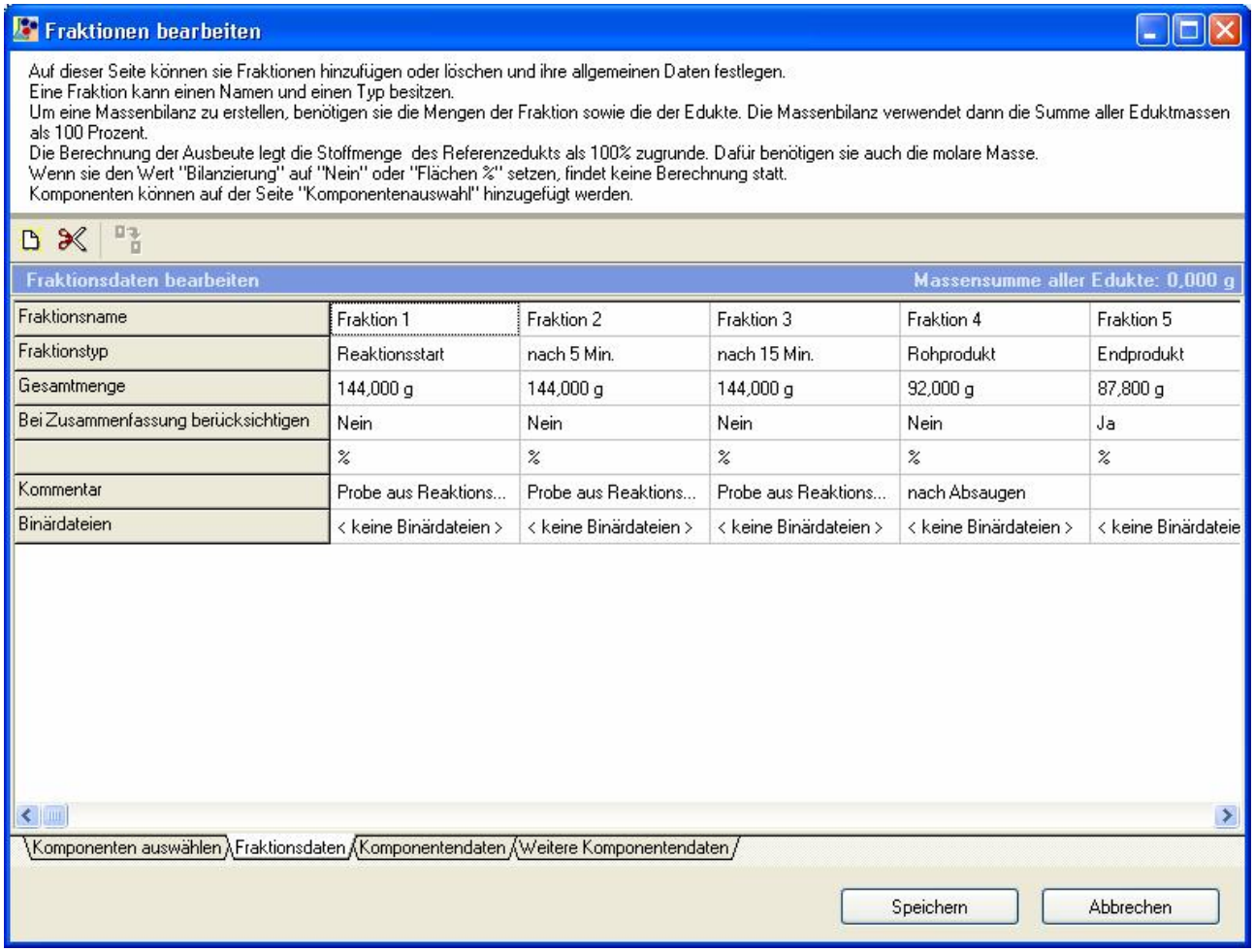
Im oberen Teil der Seite sehen Sie Ihre Reaktion als Gesamtdarstellung. Es werden alle Produkte, Nebenprodukte, Edukte und Reagenzien eingeblendet, unabhängig davon, ob sie für die Fraktionen von Belang sind. Edukte, die als Lösungsmittel oder Katalysatoren gekennzeichnet sind, können in den Fraktionen nicht verwendet werden.

Sie können bei Bedarf auch weitere Produkte anlegen. Dies ist entweder über das Kontextmenü oder über die Symbolleiste möglich. Klicken Sie dazu auf „Produkt hinzufügen“ und geben Sie einen Namen für das neue Produkt ein. Es wird zu der Liste der bereits existierenden Produkte hinzugefügt, ist in der Reaktion jedoch nicht sichtbar, da es über keine Struktur verfügt. Eine solche können Sie über den Eingabeassistenten einfügen (siehe Kapitel 3: „Erstellen Sie Ihr erstes Experiment“). Dort können Sie außerdem weitere Daten wie Substanzcode oder Charge angeben.

Bitte beachten Sie, dass die Funktionen „Produkt bearbeiten“ und „Produkt löschen“ nur für soeben in diesem Dialog angelegte Produkte verfügbar sind. Bereits bestehende Produkte müssen über den Eingabeassistenten gelöscht werden.

Im Fraktionsmodul können keine neuen Edukte erstellt werden. Auch das Bearbeiten und Löschen von bestehenden Edukten ist nicht möglich.

Nachdem Sie Ihre Auswahl getroffen haben, können Sie zur Seite „Fraktionsdaten“ weitergehen:



Auf dieser Seite können Sie Ihren Fraktionen eine Reihe von grundlegenden Daten zuweisen. Dazu zählen der Namen der Fraktion, der Fraktionstyp und die Masse der analysierten Fraktion, aus der die zu analysierende Probe entnommen wurde. Weiterhin können Sie hier definieren in welcher Form die Analytikergebnisse vorliegen - als Massen- oder Flächenprozente. Um weitergehende Berechnungen (z.B. Mol, Ausbeute) durchführen zu können, müssen die Analytikdaten als Massenprozente vorliegen. Sie können verschiedene Fraktionen rechnerisch zusammenfassen, indem Sie „Bei Zusammenfassung berücksichtigen“ „Ja“ auswählen.
In diesem Fall ist es jedoch sinnvoll, nur die letzte Fraktion „Endprodukt“ in der Zusammenfassung zu berücksichtigen, da alle anderen Fraktionen lediglich Zwischenschritte darstellen.

Optional können Sie auch noch einen Kommentar und beliebige Binärdaten (Anhänge) zur Fraktion hinzufügen.

Um eines der Felder zu editieren, wählen Sie es bitte zuerst mit der Maus oder den Pfeiltasten Ihrer Tastatur aus und klicken Sie dann hinein bzw. drücken Sie die Eingabetaste. Die beiden ersten Felder sind Textfelder, die jeden beliebigen Inhalt annehmen können. Die Gesamtmenge ist ein zweigeteiltes numerisches Feld:

Auf der linken Seite können Sie den gewünschten Wert eingeben. Mit der Auswahlliste auf der rechten Seite legen Sie die Einheit fest.

Das Dimensionsfeld ist ein Auswahlfeld, in dem keine Freieingabe möglich ist, genauso wie bei dem Ja/Nein-Feld „Bei der Zusammenfassung“. Der Kommentar ist wieder ein Textfeld.

Um eine neue Fraktion anzulegen, klicken Sie bitte auf den Knopf „Fraktion hinzufügen“ in der Symbolleiste. ensochemLab wird dann eine weitere Spalte in die Tabelle einfügen. Eine bestehende Fraktion können Sie dem Knopf „Fraktion löschen“ entfernen.
Beide Funktionen stehen auch über das Kontextmenu zur Verfügung.

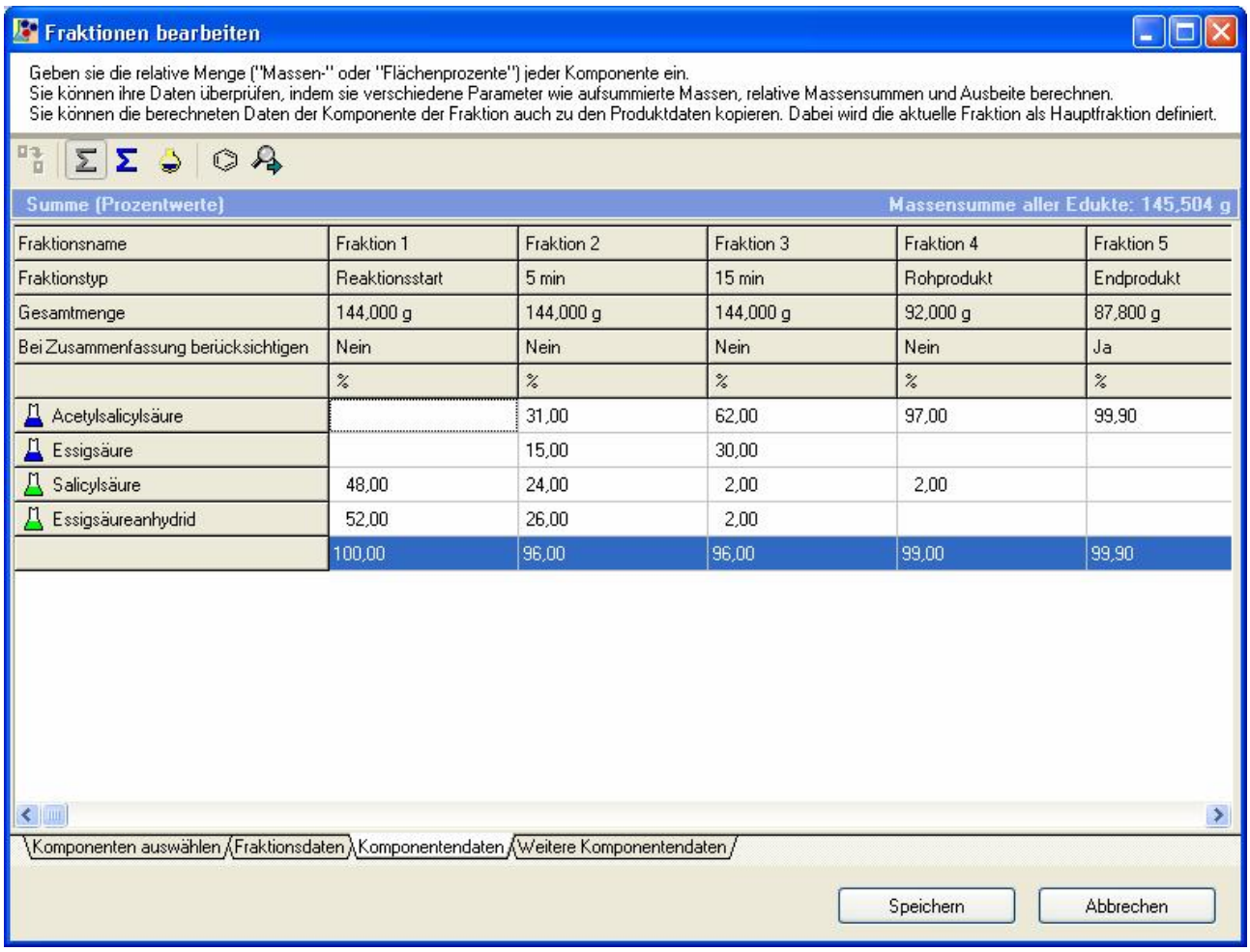
Das Feld „Binärdaten“ kann nicht direkt im Fraktionsdialog bearbeitet werden, sondern öffnet ein neues Fenster:

Klicken Sie auf „Neuer Binärdatensatz“, um einen neuen Binärdatensatz anzulegen. Danach werden Sie zur Auswahl einer Binärdatei auf Ihrer lokalen Festplatte aufgefordert. Nachdem die Datei erfolgreich importiert wurde, können Sie eine Beschreibung für den Binärdatensatz angeben.
Um eine Vorschau eines Binärdatensatzes zu sehen, klicken Sie bitte auf den entsprechenden Eintrag in der Liste. Die Vorschau wird dann im unteren Teil des Fensters angezeigt. Bitte beachten Sie, dass eine Vorschau nur für Bilddateien im BMP-, JPG oder PNG-Format möglich ist, sofern kein anderes Anzeigemodul auf dem Server oder dem lokalen Computer verfügbar ist.
Um den aktuellen Datensatz zu löschen, klicken Sie bitte auf „Binärdatensatz löschen“.

Um nach dem Importieren sämtlicher Binärdaten zum Fraktionsdialog zurückzukehren, klicken Sie bitte auf „Schließen“.

Im Tabellenfeld „Binärdaten“ wird danach die Anzahl der importierten Dateien angezeigt.

Wir sind nun soweit, zur Seite „Komponentendaten“ überzugehen:


Fraktionen bearbeiten
Geben sie die relative Menge ("Massen-" oder "Flächenprozente") jeder Komponente ein.
Sie können ihre Daten überprüfen, indem sie verschiedene Parameter wie aufsummierte Massen, relative Massensummen und Ausbeite berechnen.
Sie können die berechneten Daten der Komponente der Fraktion auch zu den Produktdaten kopieren. Dabei wird die aktuelle Fraktion als Hauptfraktion definiert.
Summe (Prozentwerte)
Massensumme aller Edukte: 145,504 g
Komponenten auswählen
Fraktionsdaten
Komponentendaten
Weitere Komponentendaten
Speichern
Abbrechen

Fraktionsname	Fraktion 1	Fraktion 2	Fraktion 3	Fraktion 4	Fraktion 5
Fraktionstyp	Reaktionsstart	5 min	15 min	Rohprodukt	Endprodukt
Gesamtmenge	144,000 g	144,000 g	144,000 g	92,000 g	87,800 g
Bei Zusammenfassung berücksichtigen	Nein	Nein	Nein	Nein	Ja
	%	%	%	%	%
Acetylsalicylsäure		31,00	62,00	97,00	99,90
Essigsäure		15,00	30,00		
Salicylsäure	48,00	24,00	2,00	2,00	
Essigsäureanhydrid	52,00	26,00	2,00		
	100,00	96,00	96,00	99,00	99,90

Auf dieser Seite können Sie die Verteilung der einzelnen Edukte und Produkte auf die in den vorherigen Schritten angelegten Fraktionen angeben. Es handelt sich dabei grundsätzlich um Prozentwerte, die sich, je nach Ihren Angaben auf der vorherigen Seite, entweder auf Massen oder Peakflächen beziehen können.

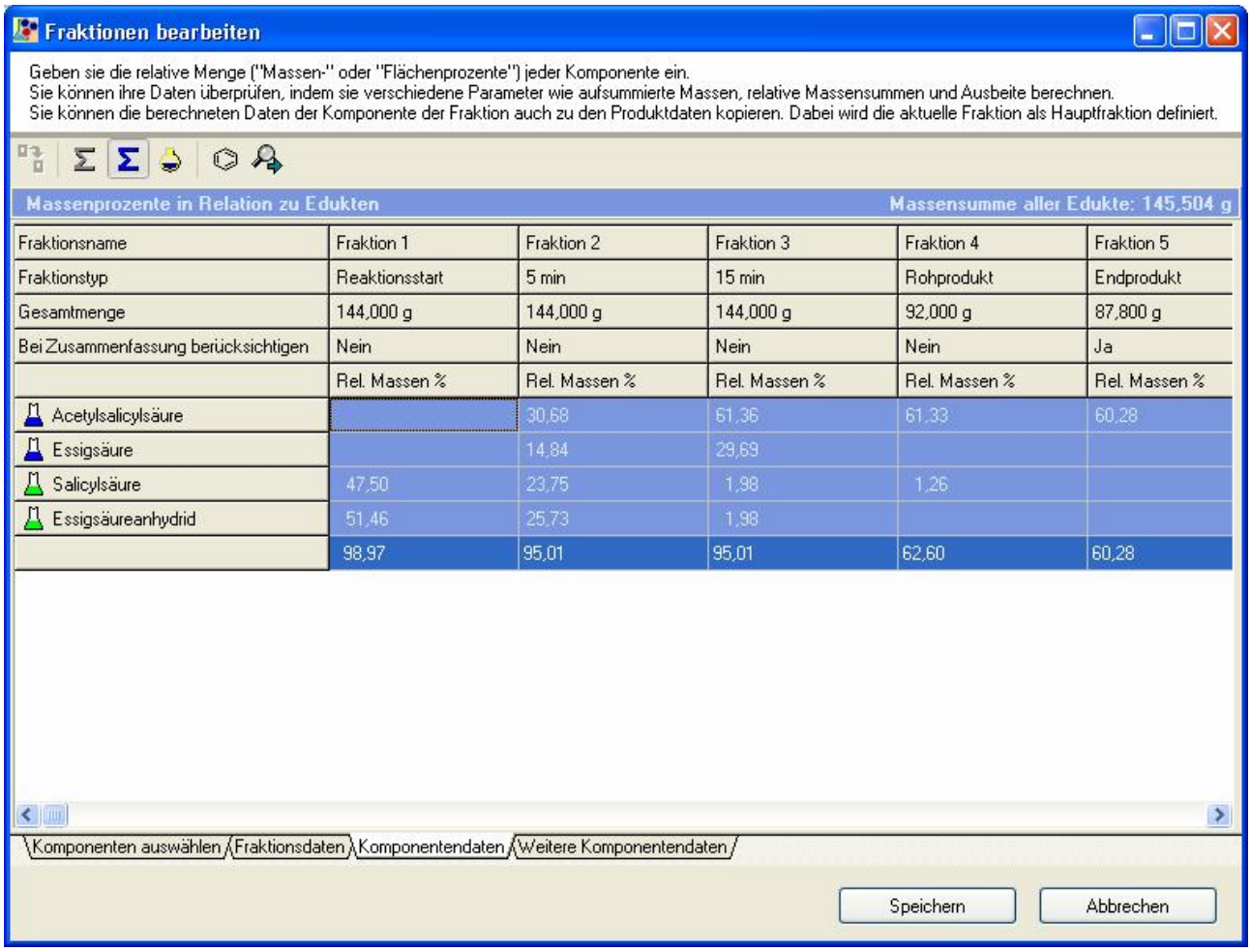
Beim Start der Reaktion (Fraktion 1) sind noch keine Produkte vorhanden. Der Anteil an Produkten erhöht sich mit zunehmender Reaktionsdauer (bis Fraktion 3). Im Rohprodukt wurde Essigsäure und Essigsäureanhydrid ausgewaschen und es bleiben das Endprodukt Acetylsalicylsäure und nur ein Rest Salicylsäure übrig (Fraktion 4, der durch Umkristallisieren entfernt wird (Fraktion 5).

In der unteren Zeile wird optional die Summe der Massenprozente einer Fraktion angezeigt. Diese Summe sollte im Idealfall 100% betragen, wenn keine weiteren Peaks im Elutionsprofil der HPLC etc. auftauchen, die nicht in den Fraktionskomponenten enthalten sind.

Mit dem Knopf „Molekülstrukturen anzeigen“ können Sie die Strukturen der einzelnen Komponenten in der Tabelle ein- und ausblenden. Die Strukturen werden immer in einer gesonderten Spalte rechts des Komponentennamens angezeigt.

Der Knopf „Daten des Referenzedukts anzeigen“ blendet auf der rechten Seite die wichtigsten Daten des Referenzedukts (Name, Molare Masse, Molzahl und eingesetzte Menge) ein. Durch erneutes Anklicken des Knopfes können diese Informationen wieder ausgeblendet werden.

Mit dem Button „Massen-/ Flächenprozente in Relation zu den Edukten“ können Sie sich Massenbilanzen anzeigen lassen. Zu jeder Komponente in den Fraktionen wird das Massenverhältnis zur Gesamtmasse der Edukte berechnet. In der äußersten rechten Spalte wird die Summe aus allen Fraktionen angezeigt, die in der Zusammenfassung berücksichtigt werden sollen und die keine Flächenprozente als Einheit haben. Die Massenrelationen werden auch für jede Fraktion berechnet, so dass Massenverluste leicht verfolgt werden können.

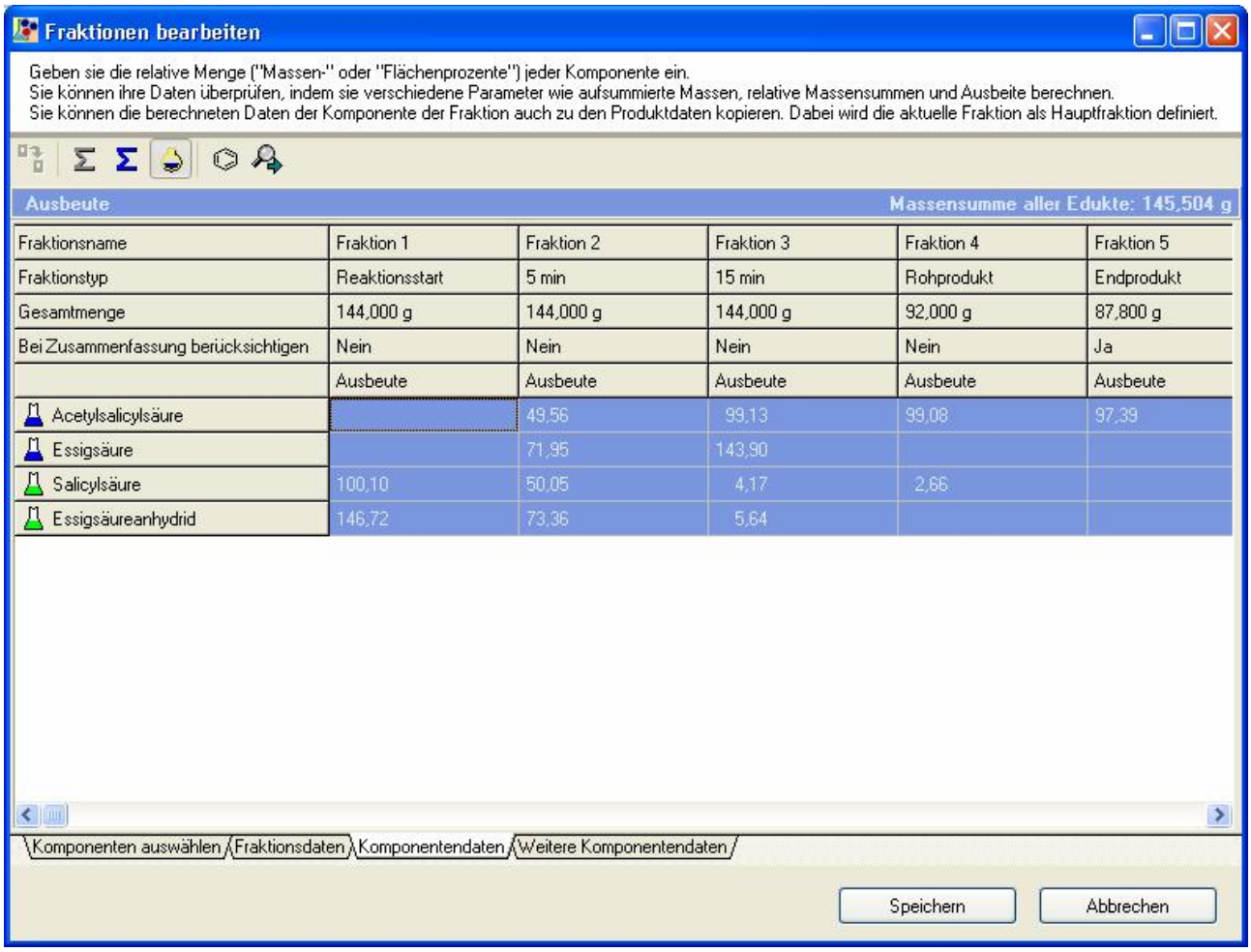

Fraktionen bearbeiten
Geben sie die relative Menge ("Massen-" oder "Flächenprozente") jeder Komponente ein.
Sie können ihre Daten überprüfen, indem sie verschiedene Parameter wie aufsummierte Massen, relative Massensummen und Ausbeite berechnen.
Sie können die berechneten Daten der Komponente der Fraktion auch zu den Produktdaten kopieren. Dabei wird die aktuelle Fraktion als Hauptfraktion definiert.
Massenprozente in Relation zu Edukten
Massensumme aller Edukte: 145,504 g
Komponenten auswählen
Fraktionsdaten
Komponentendaten
Weitere Komponentendaten
Speichern
Abbrechen

Fraktionsname	Fraktion 1	Fraktion 2	Fraktion 3	Fraktion 4	Fraktion 5
Fraktionstyp	Reaktionsstart	5 min	15 min	Rohprodukt	Endprodukt
Gesamtmenge	144,000 g	144,000 g	144,000 g	92,000 g	87,800 g
Bei Zusammenfassung berücksichtigen	Nein	Nein	Nein	Nein	Ja
	Rel. Massen %	Rel. Massen %	Rel. Massen %	Rel. Massen %	Rel. Massen %
Acetylsalicylsäure		30,68	61,36	61,33	60,28
Essigsäure		14,84	29,69		
Salicylsäure	47,50	23,75	1,98	1,26	
Essigsäureanhydrid	51,46	25,73	1,98		
	98,97	95,01	95,01	62,60	60,28

Berechnung der Massenbilanz von Acetylsalicylsäure in Fraktion 5:

Eingesetze Masse:	Salicylsäure	069,05g
	Essigsäureanhydrid	075,21g
	Schwefelsäure	000,92g
Gesamtmasse der Edukte		**145,18g**
Gesamtmasse der Fraktion 5	87,8g	
Anteil an Acetylsylicylsäure	99,9%	
Berechnete Masse der Acetylsylicylsäure	**87,71g**	
Verhältnis	**87,71 / 145,18 =**	**60,4%**

Wenn Sie auf „Ausbeute“ klicken, rechnet ensochemLab die Ausbeute der einzelnen Komponenten bezogen auf das Referenzedukt aus. In der Anzeige blendet ensochemLab bei dieser Ansicht die Gesamtausbeute einer Komponente über alle Fraktionen ein.

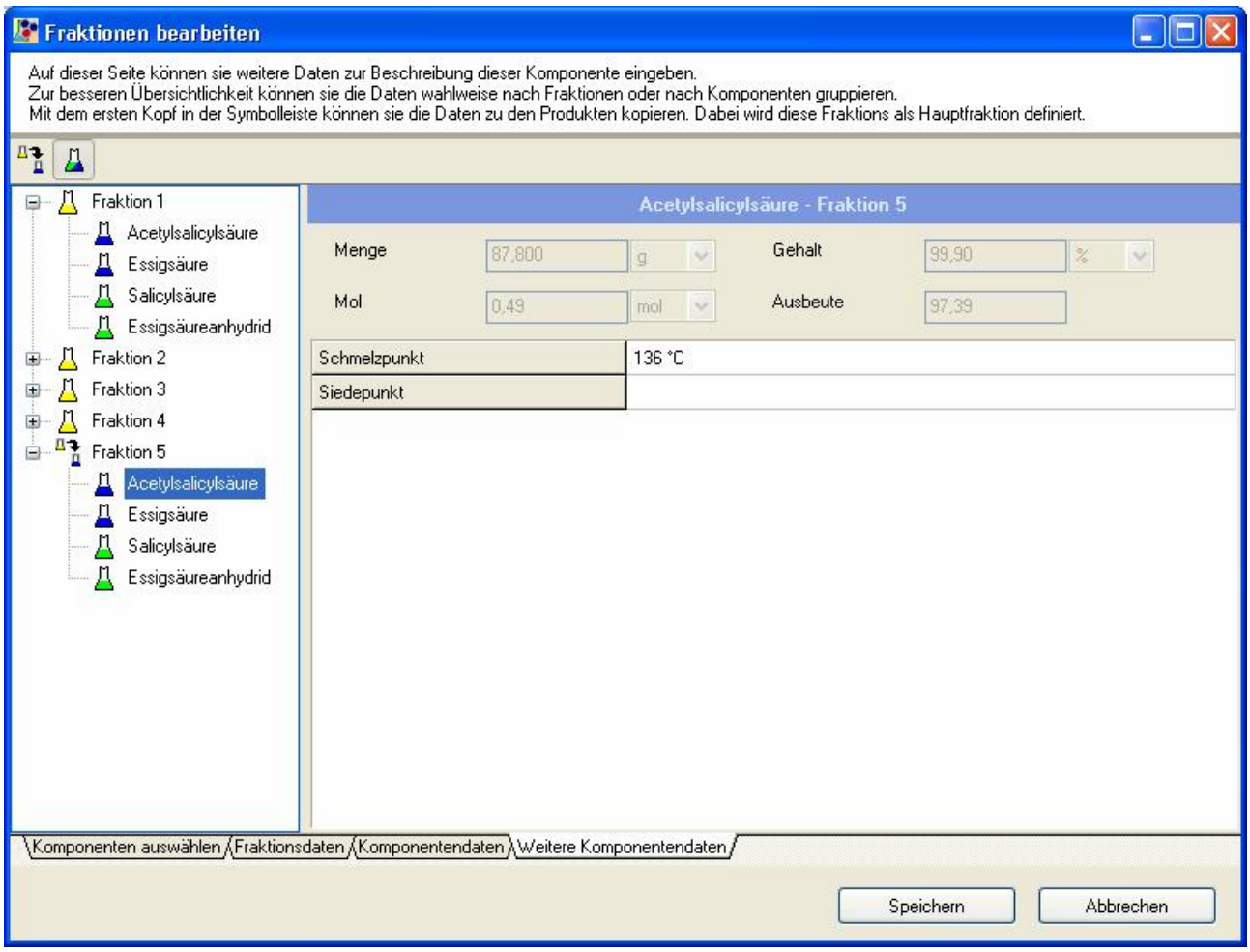

Fraktionen bearbeiten
Geben sie die relative Menge ("Massen-" oder "Flächenprozente") jeder Komponente ein.
Sie können ihre Daten überprüfen, indem sie verschiedene Parameter wie aufsummierte Massen, relative Massensummen und Ausbeite berechnen.
Sie können die berechneten Daten der Komponente der Fraktion auch zu den Produktdaten kopieren. Dabei wird die aktuelle Fraktion als Hauptfraktion definiert.
Ausbeute
Massensumme aller Edukte: 145,504 g
Fraktionsname | Fraktion 1 | Fraktion 2 | Fraktion 3 | Fraktion 4 | Fraktion 5
Fraktionstyp | Reaktionsstart | 5 min | 15 min | Rohprodukt | Endprodukt
Gesamtmenge | 144,000 g | 144,000 g | 144,000 g | 92,000 g | 87,800 g
Bei Zusammenfassung berücksichtigen | Nein | Nein | Nein | Nein | Ja
Ausbeute | Ausbeute | Ausbeute | Ausbeute | Ausbeute
Acetylsalicylsäure | | 49,56 | 99,13 | 99,08 | 97,39
Essigsäure | | 71,95 | 143,90 | |
Salicylsäure | 100,10 | 50,05 | 4,17 | 2,66 |
Essigsäureanhydrid | 146,72 | 73,36 | 5,64 |
Komponenten auswählen
Fraktionsdaten
Komponentendaten
Weitere Komponentendaten
Speichern
Abbrechen

Berechnung der Ausbeute von Acetylsalicylsäure in Fraktion 3:

Referenzedukt Salicylylsäure	069,05g	**0,500 mol**
Die Gesamtmasse der Fraktion 3	144,00g	
Anteil an Acetylsalicylsäure	62%	
Berechnete Masse der Acetylsylicylsäure	89,28g	**0,495 mol**
Ausbeute an Acetylsalicylsäure in Fraktion 3		**99%**

Sie haben eventuell schon festgestellt, dass im Fraktionsdialog nicht alle Edukte zur Verfügung stehen: Komponenten, die im Eingabeassistenten als Lösungsmittel oder Katalysator definiert wurden, können nicht Teil einer Fraktion sein. Sie werden auch nicht in die Berechnungen der Massensummen einbezogen.

Nun können wir uns der letzten Seite des Fraktionsdialogs, den zusätzlichen Komponentendaten, widmen:

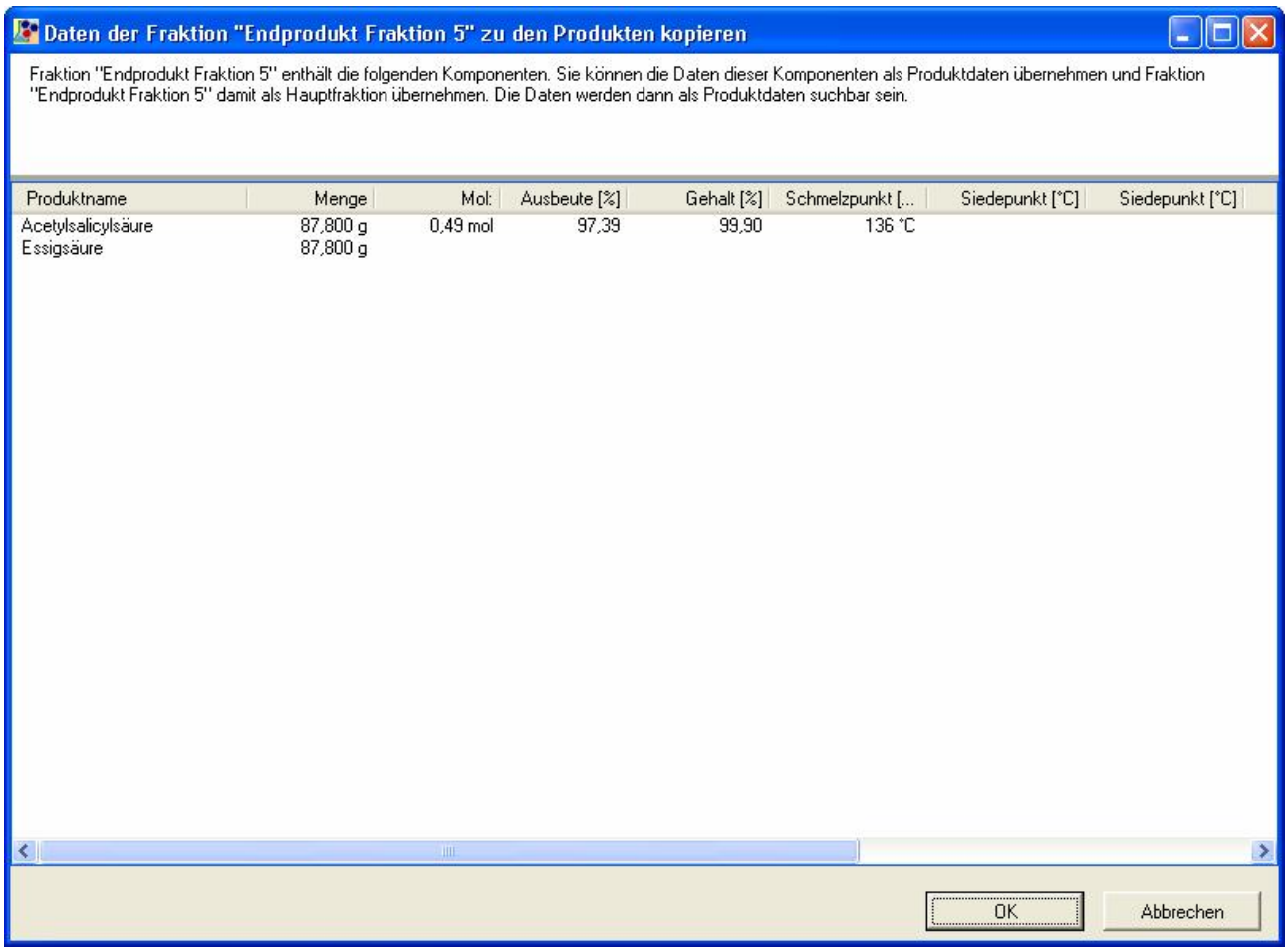


Auf dieser Seite können zusätzliche Daten zu den Edukten und Produkten einer bestimmten Fraktion angeben. ensochemLab bietet dazu auf der linken Seite eine Baumstruktur, die in der Standardansicht sämtliche Produkte und Edukte je einmal zu jeder Fraktion auflistet.

Die Baumansicht unterstützt noch eine weitere Anordnung der Einträge. Klicken Sie auf „Nach Komponenten gruppieren“, um die einzelnen Komponenten (Edukte und Produkte) als übergeordneten Knoten zu verwenden, unter dem dann die Fraktionen aufgelistet werden.

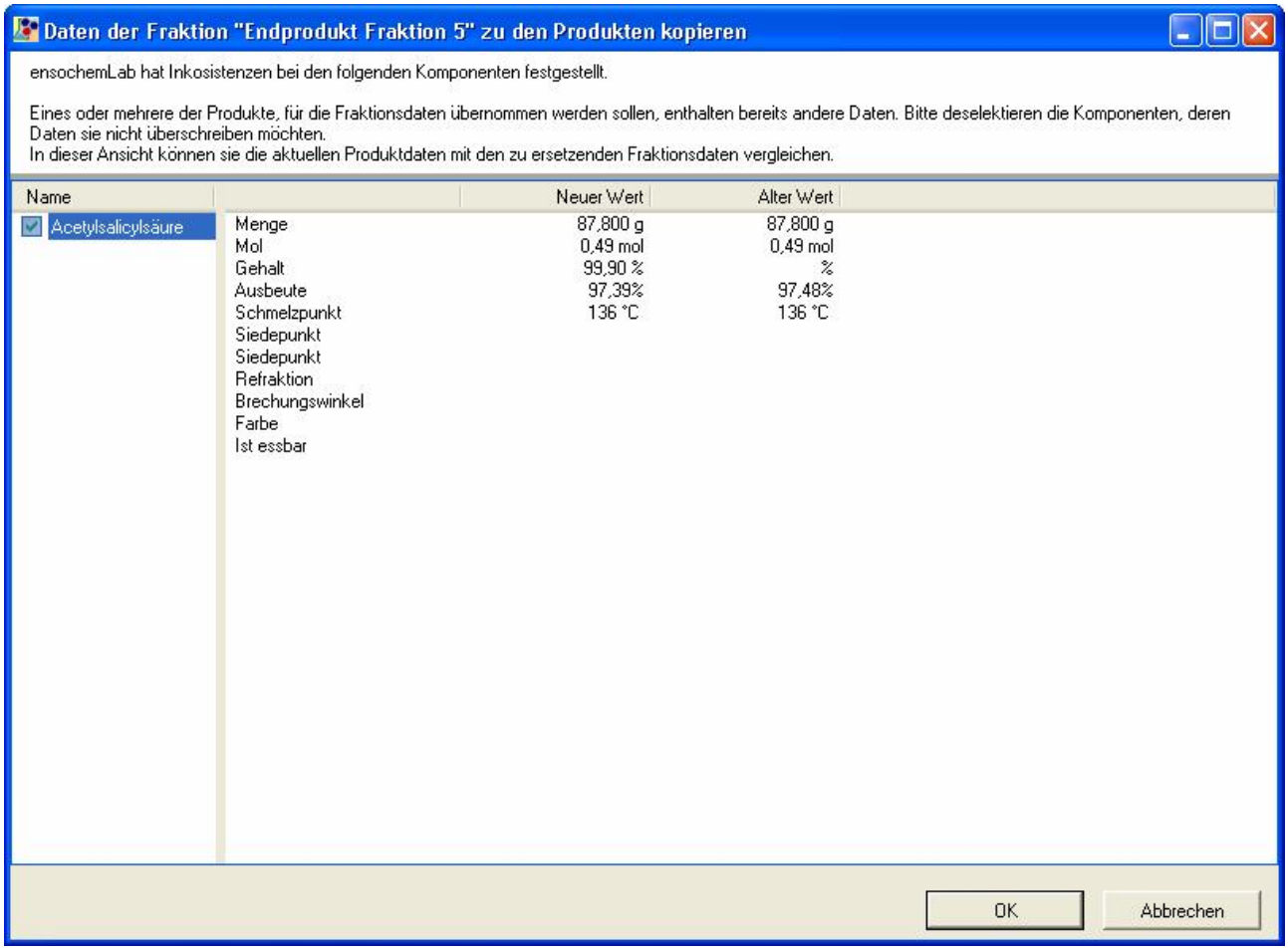
Die Funktion „Fraktionsdaten zu Produkten kopieren“ ist auf fast allen der Seiten des Fraktionsdialogs verfügbar. Mit ihr können Sie die Daten der aktuellen Fraktion als Daten Ihrer Produkte übernehmen. Dieser Button ist nur bei Fraktionen aktiv, die bei der Zusammenfassung berücksichtigt werden.

Wenn Sie auf den entsprechenden Knopf klicken, erscheint das folgende Fenster:



Dieses Fenster gibt noch einmal eine Aufstellung über die Produkte, die auf der ersten Seite des Fraktionsdialogs für die Verwendung ausgewählt haben. Dabei werden die wichtigsten Größen des Eingabeassistenten sowie die physikalischen Daten angezeigt. Diese Anzeige dient nicht der Auswahl eines Produkts, sondern lediglich der Auflistung.
Wenn Sie auf „OK“ klicken, werden die aktuellen Fraktionsdaten in alle hier aufgeführten Produkte übernommen. Mit einem Klick auf „Abbrechen“ kehren Sie zum Fraktionsdialog zurück, ohne die Daten zu übernehmen.

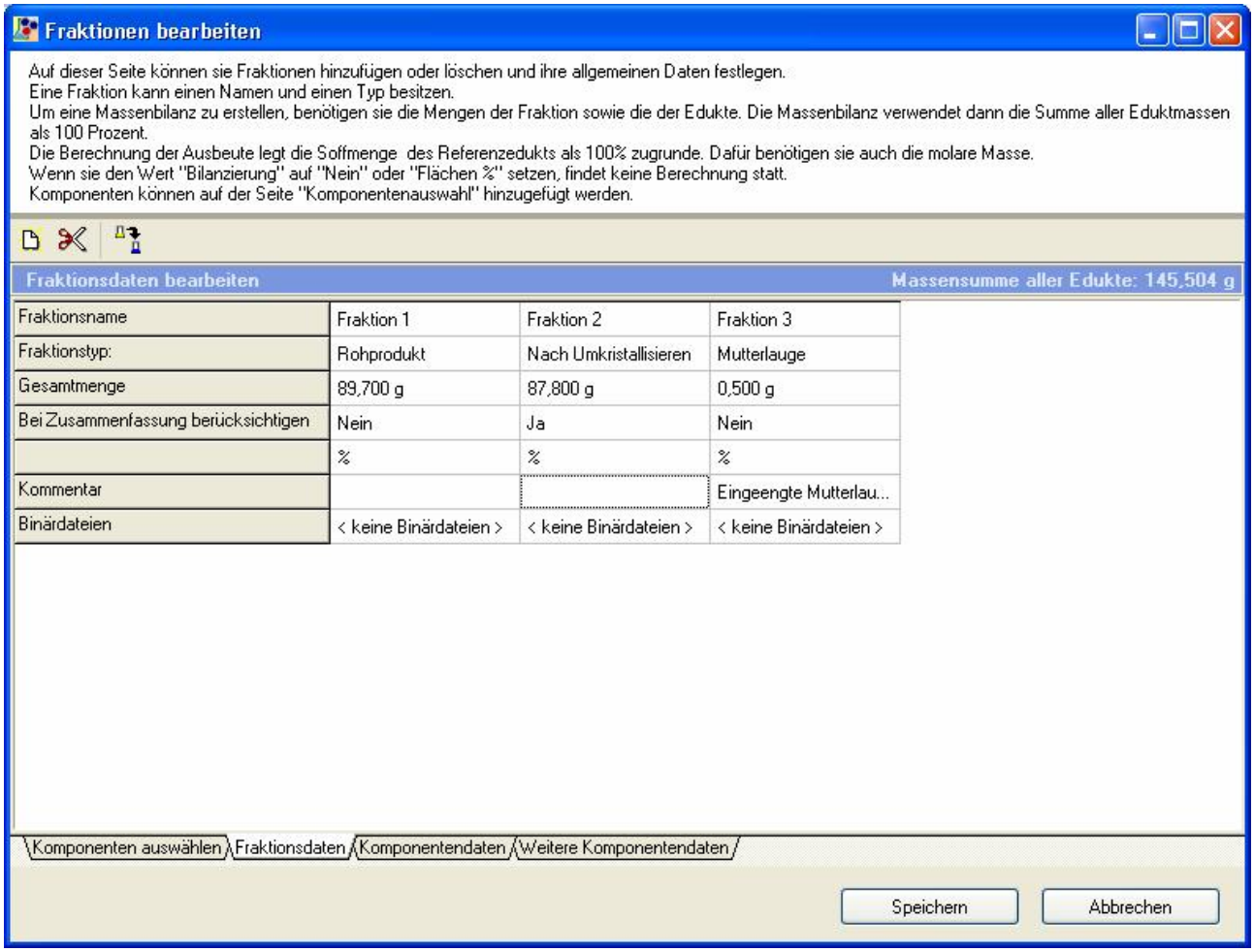
Sollten eines oder mehrere Produkte bereits über abweichende Daten verfügen, wird der folgende Dialog angezeigt:


Daten der Fraktion "Endprodukt Fraktion 5" zu den Produkten kopieren
ensochemLab hat Inkosistenzen bei den folgenden Komponenten festgestellt.
Eines oder mehrere der Produkte, für die Fraktionsdaten übernommen werden sollen, enthalten bereits andere Daten. Bitte deselektieren die Komponenten, deren Daten sie nicht überschreiben möchten.
In dieser Ansicht können sie die aktuellen Produktdaten mit den zu ersetzenden Fraktionsdaten vergleichen.
Name
Neuer Wert
Alter Wert
Acetylsalicylsäure
Menge 87,800 g 87,800 g
Mol 0,49 mol 0,49 mol
Gehalt 99,90 % %
Ausbeute 97,39% 97,48%
Schmelzpunkt 136 °C 136 °C
Siedepunkt
Siedepunkt
Refraktion
Brechungswinkel
Farbe
Ist essbar
OK
Abbrechen

Sie können nun in der linken Liste die Produkte auswählen, für die Sie die neuen Daten übernehmen möchten. Zu jeder Auswahl auf der linken Seite zeigt ensochemLab auf der rechten Seite die alten und neuen, d.h. die bereits vorhandenen und die zu übernehmenden, Daten an. Es ist an dieser Stelle nicht möglich, die Daten direkt zu verändern.
Mit einem Klick auf „OK“ werden die Daten in die ausgewählten Produkte übernommen. Wenn Sie auf „Abbrechen“ klicken, kehren Sie zum Fraktionsdialog zurück, ohne Daten in die Produkte zu schreiben.

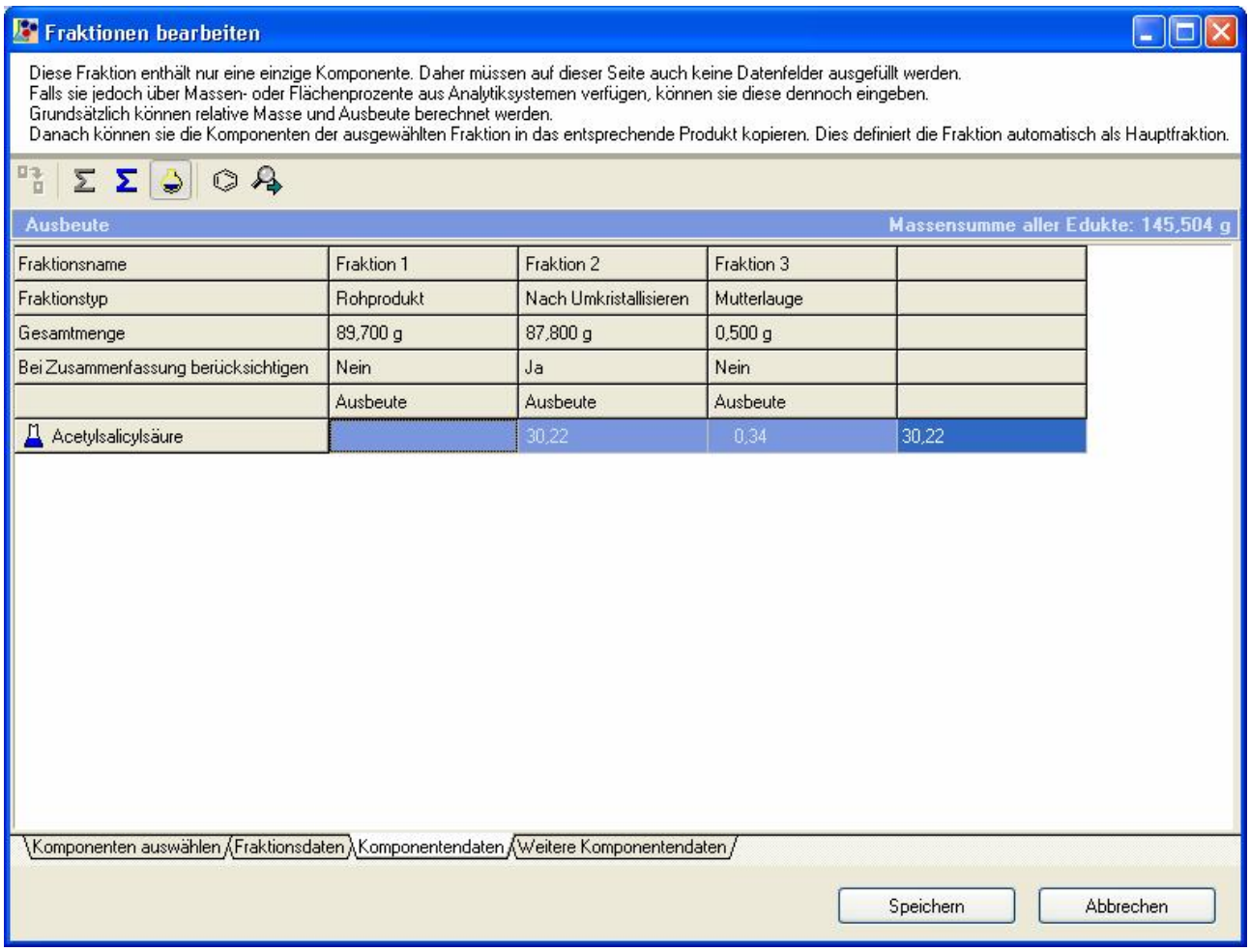
14.2. Beispiel B

Sie haben kein HPLC o.ä. zur Verfügung und wollen lediglich die Reinigung eines Produkts (Acetylsalicylsäure) dokumentieren. Als Ausgangspunkt kopieren Sie am besten wieder, wie in Beispiel A, die Salicylsäuresythese in ein neues Experiment und speichern es ab.
Diesmal wählen Sie im Fraktionsdialog nur die Komponente Acetylsalicylsäure aus und entfernen den Haken in der Zeile der Essigsäure. Die Seite „Fraktionsdaten“ füllen Sie wie folgt aus.



Auf der Seite Komponentendaten gibt es nichts auszufüllen, da die Massenprozente für eine einzelne Komponente automatisch auf 100% gesetzt werden, da die genaue Zusammensetzung der Fraktion mangels passender Analytik unbekannt ist. Deshalb näherungsweise davon ausgegangen, dass die Fraktion zu 100% aus Acetylsalicylsäure besteht.

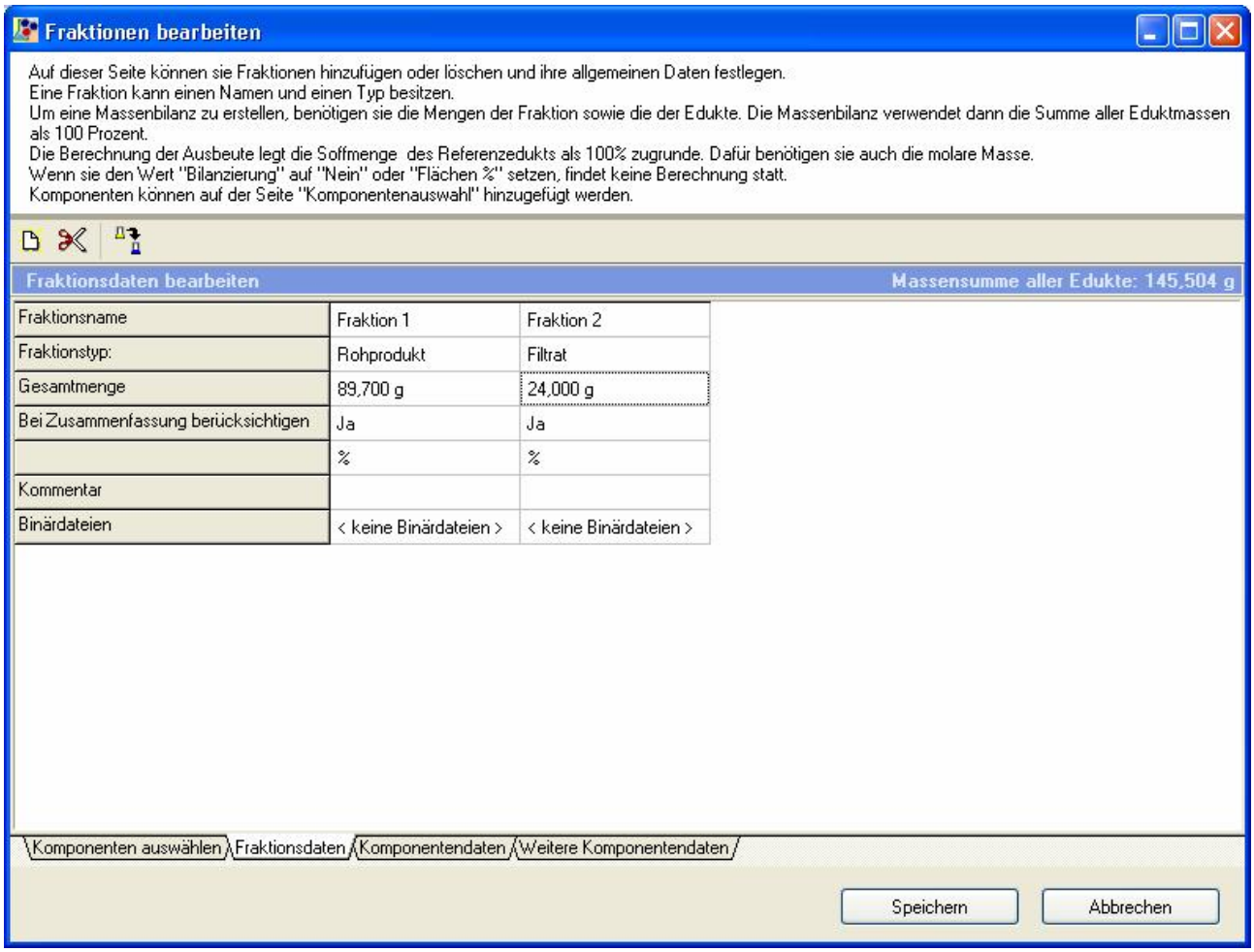
Die Anzeige der Ausbeuten sollte folgendermaßen aussehen (Die Anzeige der Struktur ist aktiviert):


Fraktionen bearbeiten
Diese Fraktion enthält nur eine einzige Komponente. Daher müssen auf dieser Seite auch keine Datenfelder ausgefüllt werden.
Falls sie jedoch über Massen- oder Flächenprozente aus Analytiksystemen verfügen, können sie diese dennoch eingeben.
Grundsätzlich können relative Masse und Ausbeute berechnet werden.
Danach können sie die Komponenten der ausgewählten Fraktion in das entsprechende Produkt kopieren. Dies definiert die Fraktion automatisch als Hauptfraktion.
Ausbeute
Massensumme aller Edukte: 145,504 g
Fraktionsname | Fraktion 1 | Fraktion 2 | Fraktion 3
Fraktionstyp | Rohprodukt | Nach Umkristallisieren | Mutterlauge
Gesamtmenge | 89,700 g | 87,800 g | 0,500 g
Bei Zusammenfassung berücksichtigen | Nein | Ja | Nein
Ausbeute | Ausbeute | Ausbeute
Acetylsalicylsäure | 30,22 | 0,34 | 30,22
Komponenten auswählen
Fraktionsdaten
Komponentendaten
Weitere Komponentendaten
Speichern
Abbrechen

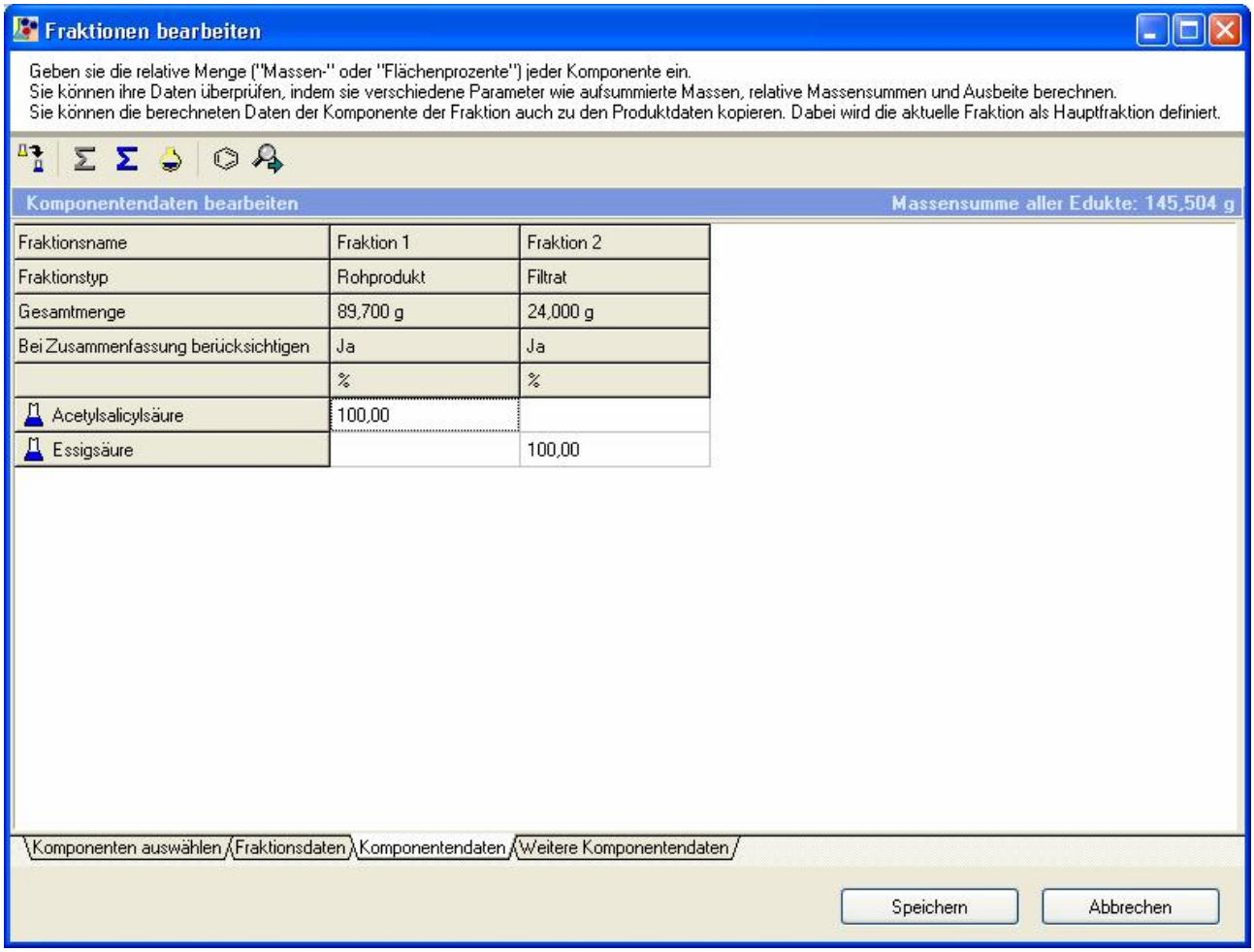
Auf der Seite „Zusätzliche Komponentendaten“ können Sie z.B. die Schmelzpunkte der einzelnen Fraktionen nachtragen oder die Daten der Hauptfraktion zum Produkt kopieren (s. Beispiel A). Ansonsten ist die Eingabe hier beendet.

14.3. Beispiel C

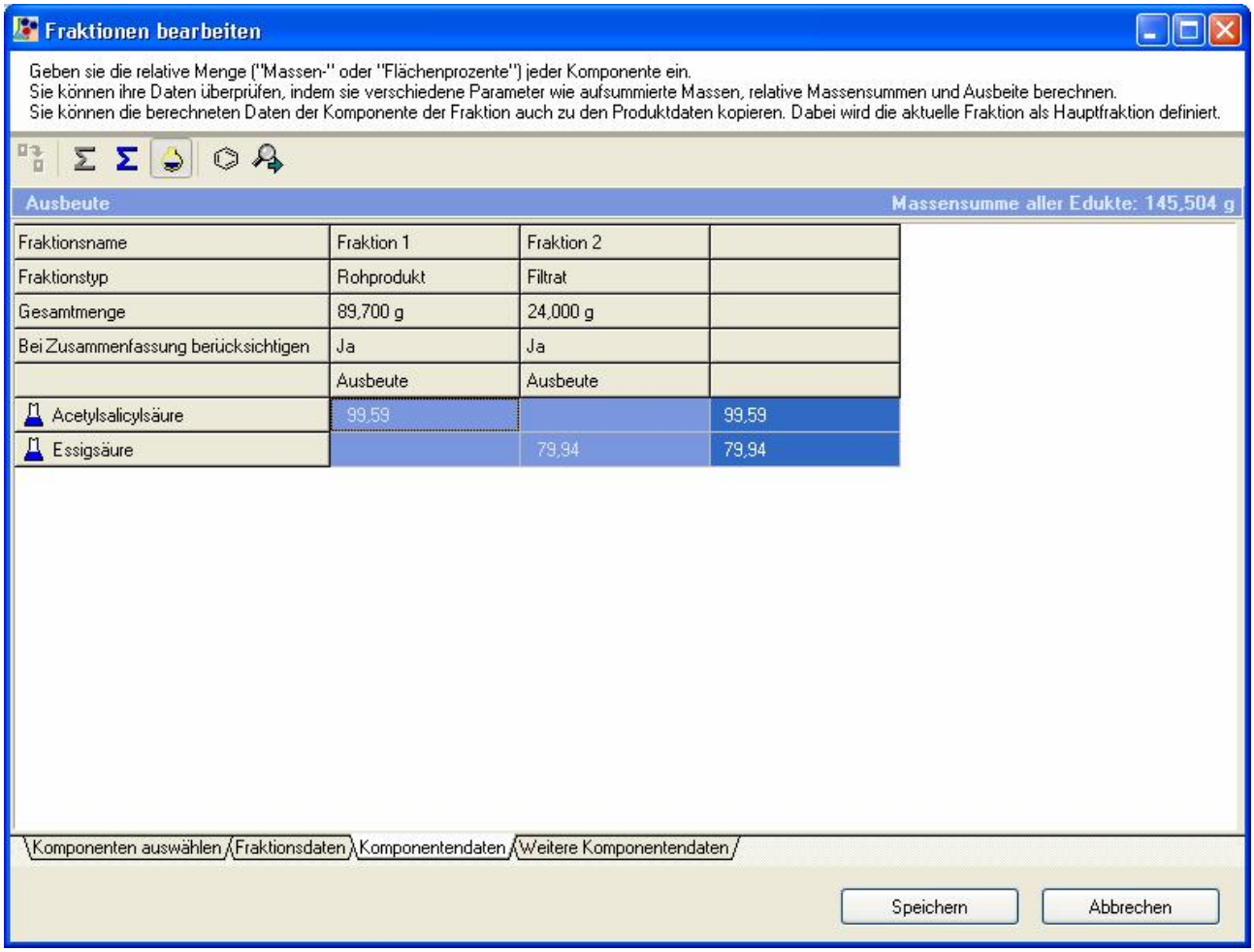
Sie starten analog Beispiel A und B. Diesmal wählen Sie in der Komponentenauswahl beide Produkte aus. Legen Sie auf der Seite „Fraktionsdaten“ zwei Fraktionen an. Beide Fraktionen sollen in der Zusammenfassung berücksichtigt werden.


Fraktionen bearbeiten
Auf dieser Seite können sie Fraktionen hinzufügen oder löschen und ihre allgemeinen Daten festlegen.
Eine Fraktion kann einen Namen und einen Typ besitzen.
Um eine Massenbilanz zu erstellen, benötigen sie die Mengen der Fraktion sowie die der Edukte. Die Massenbilanz verwendet dann die Summe aller Eduktmassen als 100 Prozent.
Die Berechnung der Ausbeute legt die Soffmenge des Referenzedukts als 100% zugrunde. Dafür benötigen sie auch die molare Masse.
Wenn sie den Wert "Bilanzierung" auf "Nein" oder "Flächen %" setzen, findet keine Berechnung statt.
Komponenten können auf der Seite "Komponentenauswahl" hinzugefügt werden.
Fraktionsdaten bearbeiten
Massensumme aller Edukte: 145,504 g
Fraktionsname
Fraktion 1
Fraktion 2
Fraktionstyp:
Rohprodukt
Filtrat
Gesamtmenge
89,700 g
24,000 g
Bei Zusammenfassung berücksichtigen
Ja
Ja
%
%
Kommentar
Binärdateien
< keine Binärdateien >
< keine Binärdateien >
Komponenten auswählen
Fraktionsdaten
Komponentendaten
Weitere Komponentendaten
Speichern
Abbrechen

Nach dem Absaugen befindet sich die Acetylsalicylsäure näherungsweise zu 100% im Rückstand und die Essigsäure dagegen zu 100% im Filtrat. Deshalb wird die Seite „Komponentendaten“ folgendermaßen ausgefüllt:



Da in diesem Fall beide Fraktionen bei der Zusammenfassung berücksichtigt werden (Die beiden Produkte wurden getrennt), sieht die Ausbeuteberechnung folgendermaßen aus:



Sie sehen in der Zusammenfassung die Ausbeute beider Produkte, obwohl sie auf zwei verschiedene Fraktionen verteilt sind.

Zusammenfassung:	Mit dem Fraktionsdialog können Sie die Verteilung von Edukten und Produkten in verschiedenen Fraktionen, sowie Reinigungen und Trennungen dokumentieren. Hierfür stehen außerdem noch physikalische Daten der jeweiligen Stoffe zur Verfügung.

15. Mehrstufige Reaktionen

Im Zuge einer vollständigen und nachvollziehbaren Dokumentation von Synthesen, spielt die Unterstützung von mehrstufigen Reaktionen eine nicht zu vernachlässigende Rolle. Insbesondere die Übersichtlichkeit der Zusammenhänge und die intuitive Bedienbarkeit verdienen ein besonderes Augenmerk.

Generell wird zwischen mehrstufigen Reaktionen deren Zwischenprodukte nicht aufgearbeitet werden und denen mit diskret vorhandenen, gesicherten Teilschritten unterschieden. Beide Varianten haben ihren festen Platz im Laboralltag.

15.1. Generelle Einführung

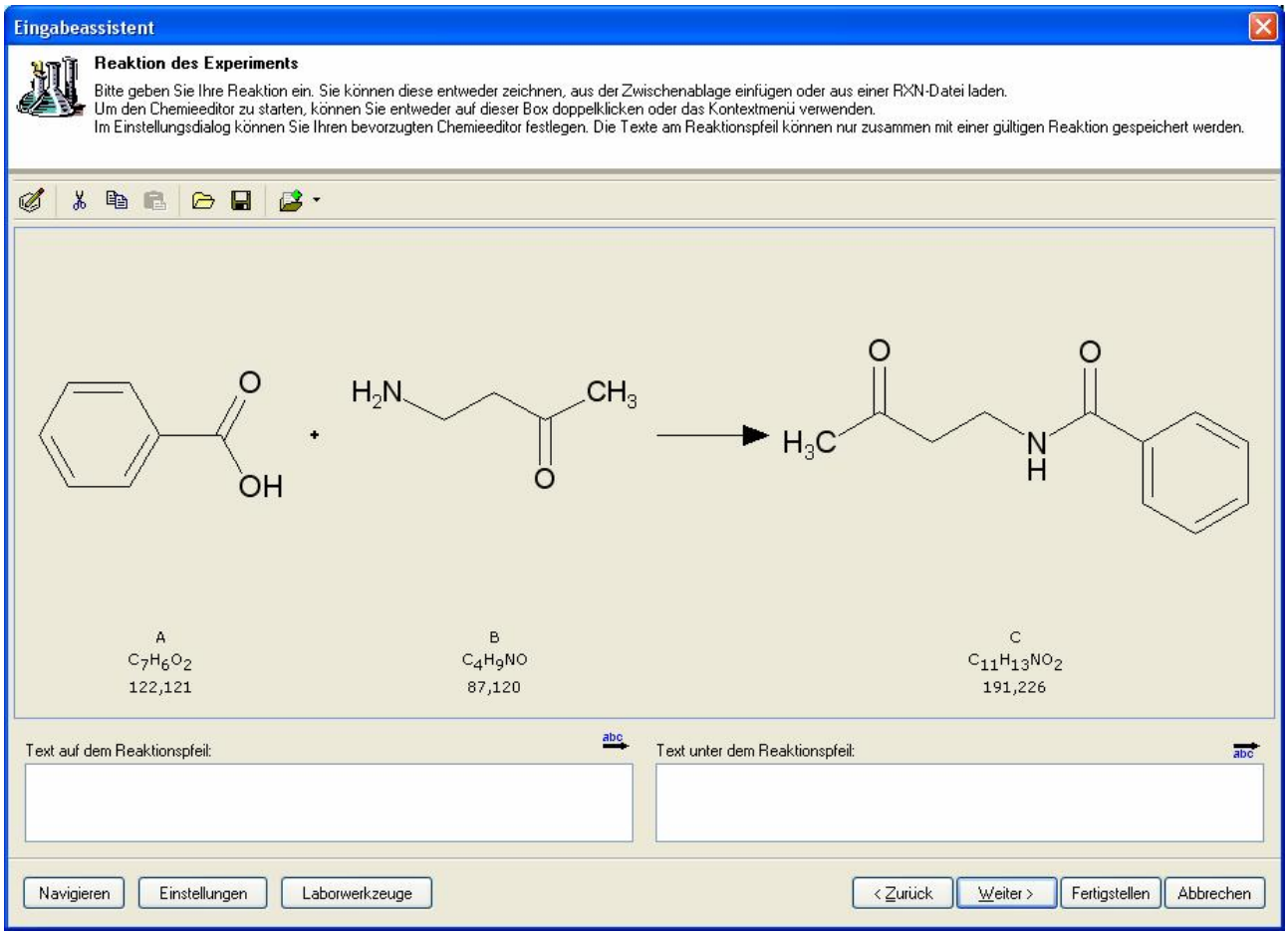
Derzeit wird von ensochemLab die Erfassung von mehrstufigen Reaktionen ohne aufgearbeitete Zwischenprodukte in einem Experiment unterstützt. Die Dokumentation von diskreten Teilschritten erfolgt mit der Funktion „Folgeexperiment erstellen" (Haupt- oder Reaktions-Kontext-Menu). In einer Folgeversion wird es zur Zusammenfassung dieser Einzelschritte ebenfalls eine komfortablere Unterstützung geben.

15.2. Datenerfassung

Um eine mehrstufige Reaktion zu dokumentieren erstellen Sie wie gewohnt ein neues Experiment, geben die Reaktion der ersten Stufe ein und erstellen dann mit Hilfe der Schaltfläche „Neue Stufe hinzufügen“ die Nachfolge oder Vorgängerstufe(n). Hierbei wird das erste Produkt zum Referenz Edukt der Folgestufe und damit zum Zwischenprodukt. In der resultierenden Gesamtreaktion tauchen diese Strukturen nicht auf.

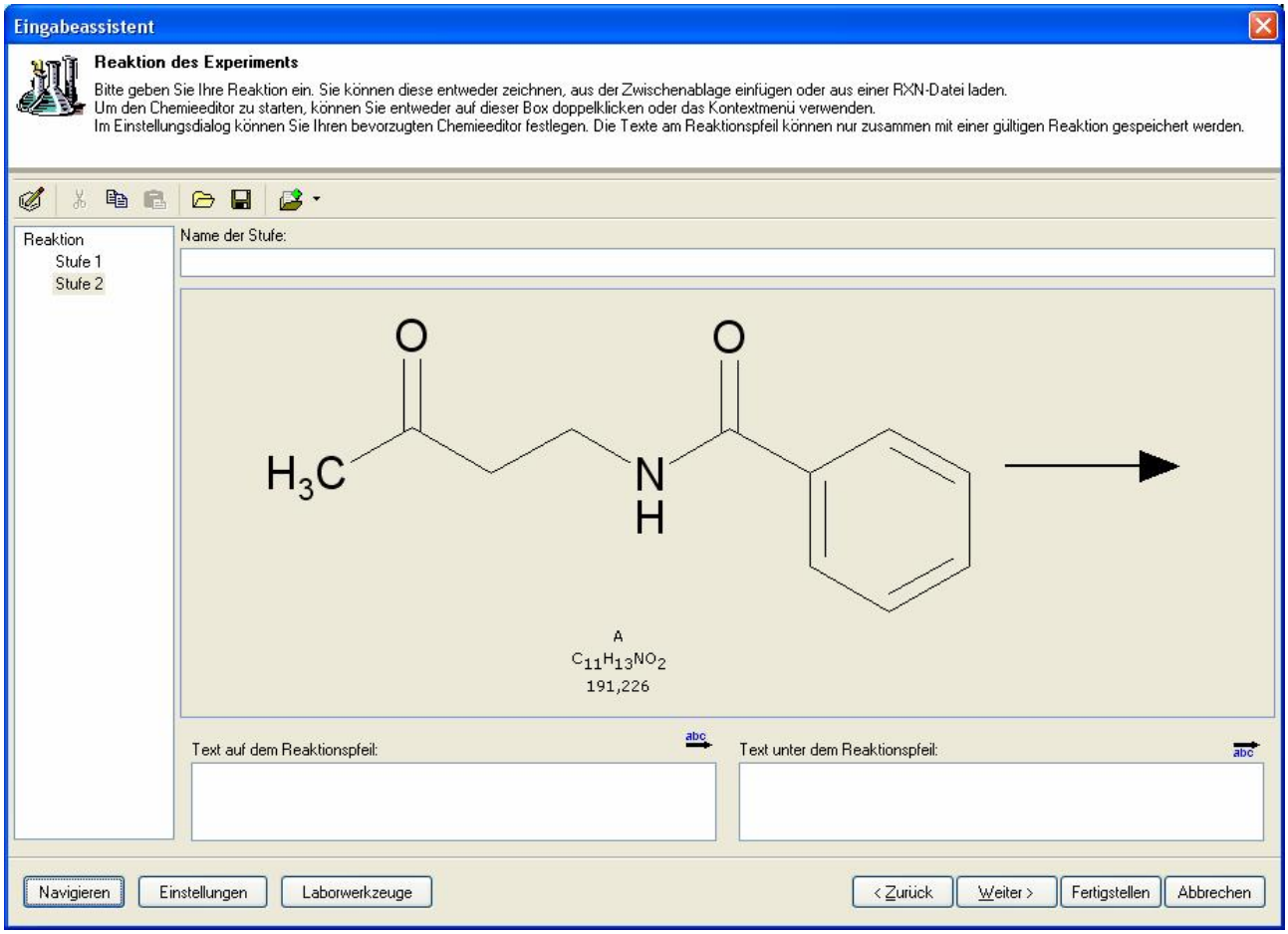
Im Folgenden wird der Vorgang veranschaulicht und Schritt für Schritt erläutert.

Zunächst geben Sie die Reaktion der ersten Stufe ein und es ergibt sich folgende Ansicht auf der Reaktionsseite im Eingabe Assistenten:


Eingabeassistent
Reaktion des Experiments
Bitte geben Sie Ihre Reaktion ein. Sie können diese entweder zeichnen, aus der Zwischenablage einfügen oder aus einer RXN-Datei laden.
Um den Chemieeditor zu starten, können Sie entweder auf dieser Box doppelklicken oder das Kontextmenü verwenden.
Im Einstellungsdialog können Sie Ihren bevorzugten Chemieeditor festlegen. Die Texte am Reaktionspfeil können nur zusammen mit einer gültigen Reaktion gespeichert werden.
A
C7H6O2
122,121
B
C4H9NO
87,120
C
C11H13NO2
191,226
Text auf dem Reaktionspfeil:
Text unter dem Reaktionspfeil:
Navigieren
Einstellungen
Laborwerkzeuge
< Zurück
Weiter >
Fertigstellen
Abbrechen

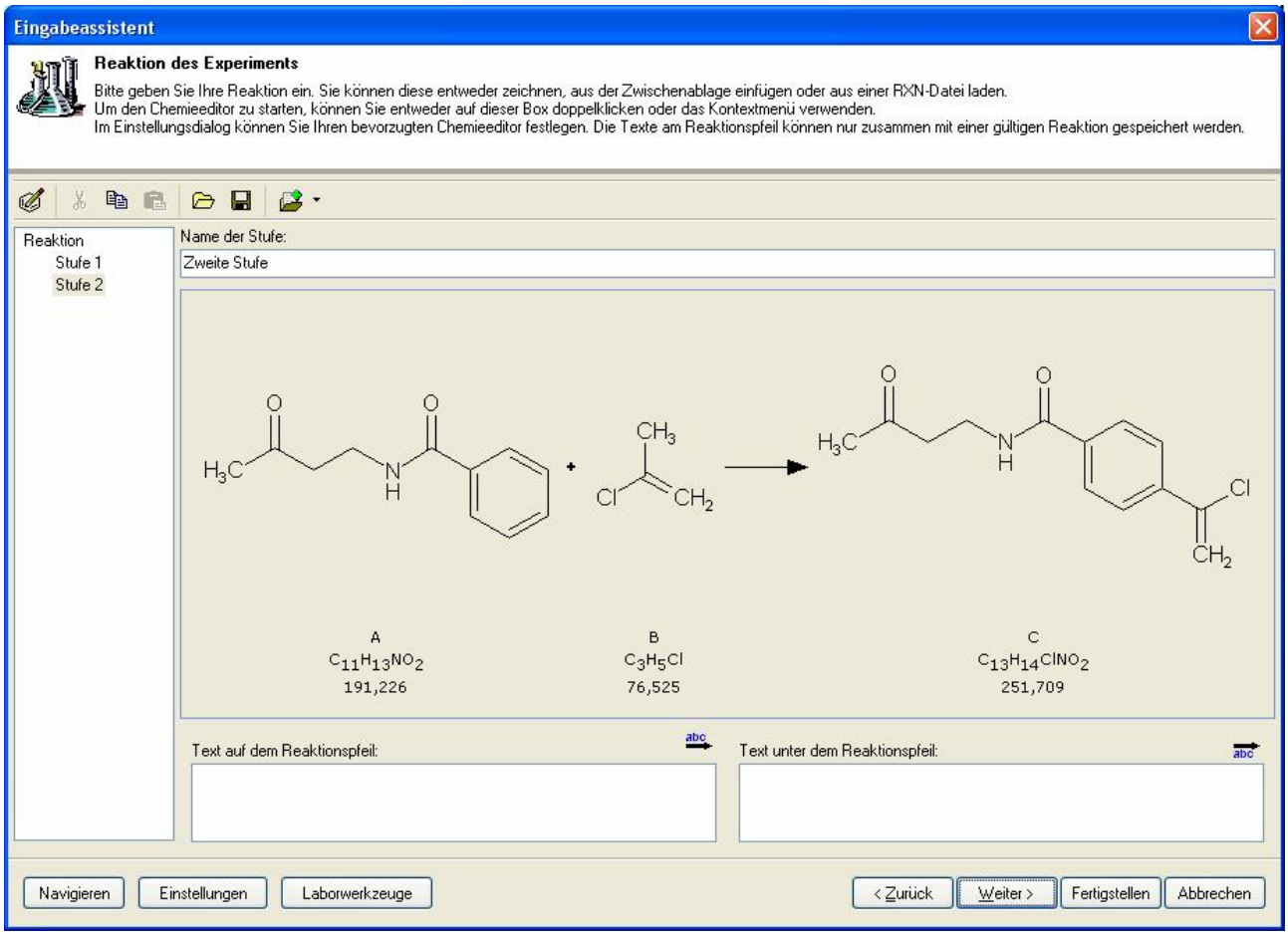
Nun erstellen Sie die zweite Stufe mit Hilfe des Befehls „Neue Stufe hinzufügen“ in der Schalterleiste.

Sie können hierbei bereits in ensochemLab verfügbare, passende Reaktionen suchen (dies wird in diesem Kapitel später noch erläutert) oder eine entsprechende Stufe anlegen um diese Reaktion direkt, wie im Assistenten gewohnt, einzugeben.

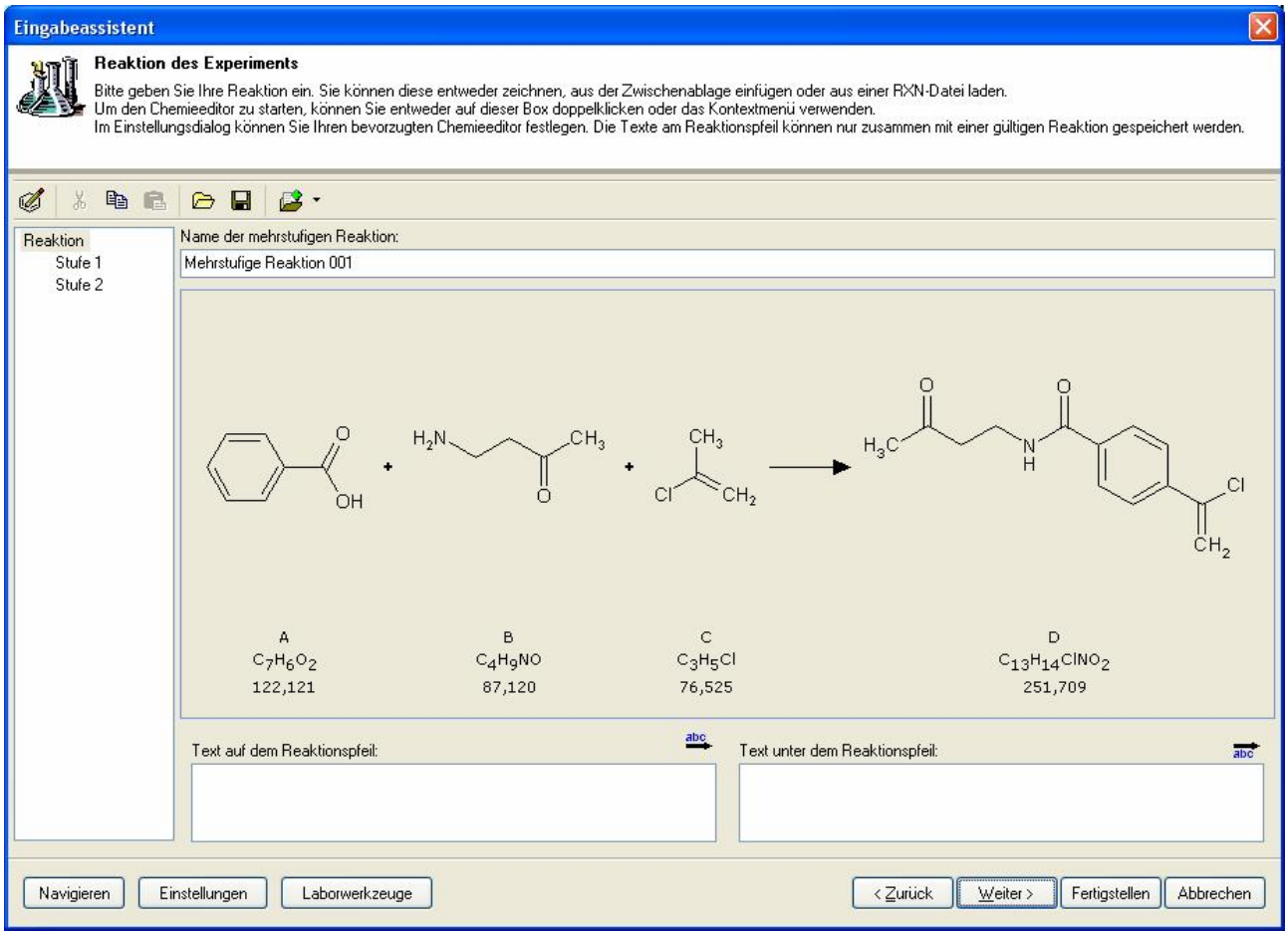

Eingabeassistent
Reaktion des Experiments
Bitte geben Sie Ihre Reaktion ein. Sie können diese entweder zeichnen, aus der Zwischenablage einfügen oder aus einer RXN-Datei laden.
Um den Chemieeditor zu starten, können Sie entweder auf dieser Box doppelklicken oder das Kontextmenü verwenden.
Im Einstellungsdialog können Sie Ihren bevorzugten Chemieeditor festlegen. Die Texte am Reaktionspfeil können nur zusammen mit einer gültigen Reaktion gespeichert werden.
Reaktion
Stufe 1
Stufe 2
Name der Stufe:
A
C11H13NO2
191,226
Text auf dem Reaktionspfeil:
Text unter dem Reaktionspfeil:
Navigieren
Einstellungen
Laborwerkzeuge
< Zurück
Weiter >
Fertigstellen
Abbrechen

ensochemLab generiert die Folgereaktion in dem des erste Produkt der bisher letzten Stufe als Edukt der neuen Reaktion gesetzt wird. Sie vervollständigen die Reaktion dann entsprechend.

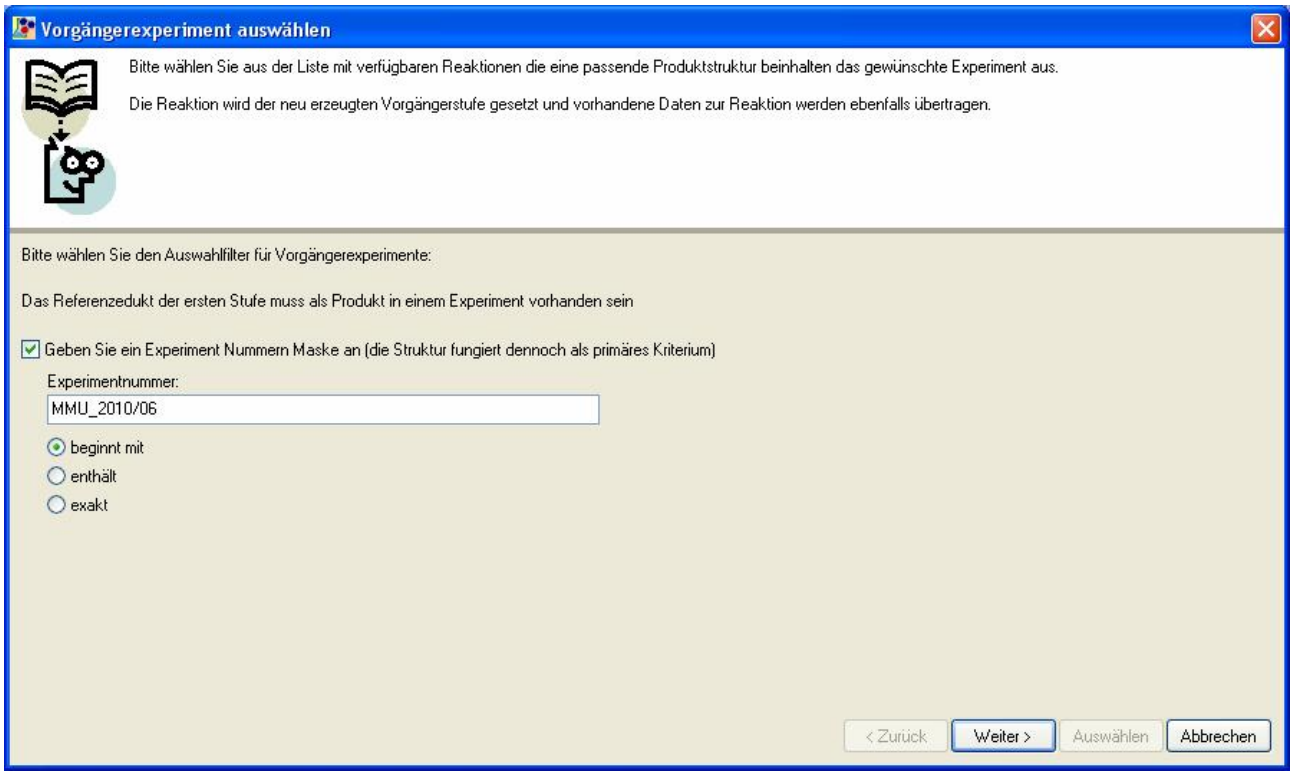
Wird eine Reaktion eingeben deren Edukt nicht zum korrespondierenden Produkt der Vorgängerstufe passt, bzw. ein Produkt enthält das vom zugehörigen Edukt der Nachfolgestufe abweicht wird dies durch einen Warnhinweis gemeldet und es besteht für Sie die Möglichkeit die bereits vorhandene Struktur zu übernehmen, selbige mit der neuen zu überschreiben oder den Bearbeitungsvorgang abzubrechen.

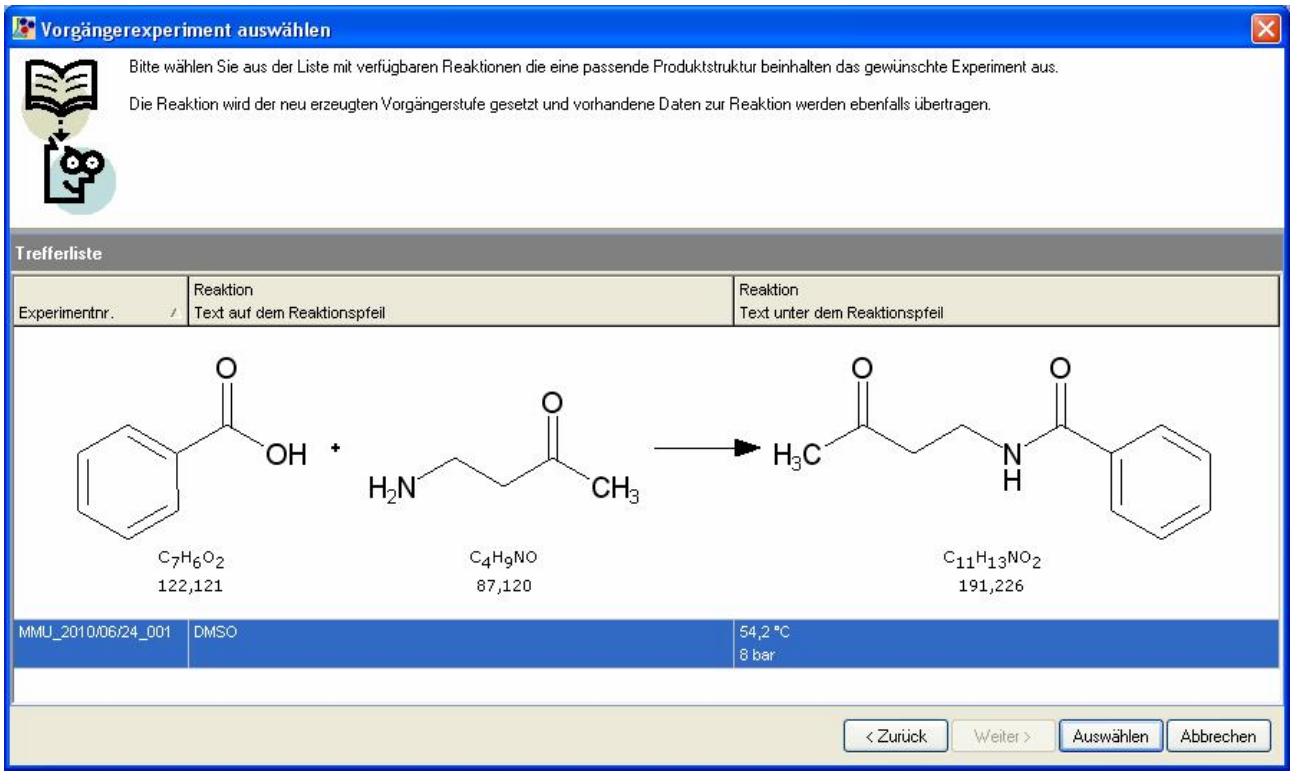


So könnte eine Folgereaktion aussehen und es ergibt sich bei Anwahl des Knotens „Reaktion“ im Baum die Gesamtreaktion. Regel bei der Bestimmung ist die aneinander Reihung der Stufenreaktionen ohne die entsprechenden Zwischenprodukte.



Wie bereits erwähnt steht Ihnen bei der Erstellung einer weiteren Stufe auch eine Nachschlagefunktion zur Verfügung. Wählen Sie hierzu aus dem Menu die entsprechende Funktion aus und suchen mit Hilfe eines Assistenten in bereits vorhandenen Reaktionen. Als Filter, zusätzlich zur Chemie, steht die optionale Angabe von Experiment Nummer Bestandteilen bereit. Generelle Regel bleibt dennoch das bei einer Folgestufe die gesuchte Reaktion ein passendes Referenz-Edukt besitzen muss, bzw. für eine Vorgängerstufe ein identisches Produkt.

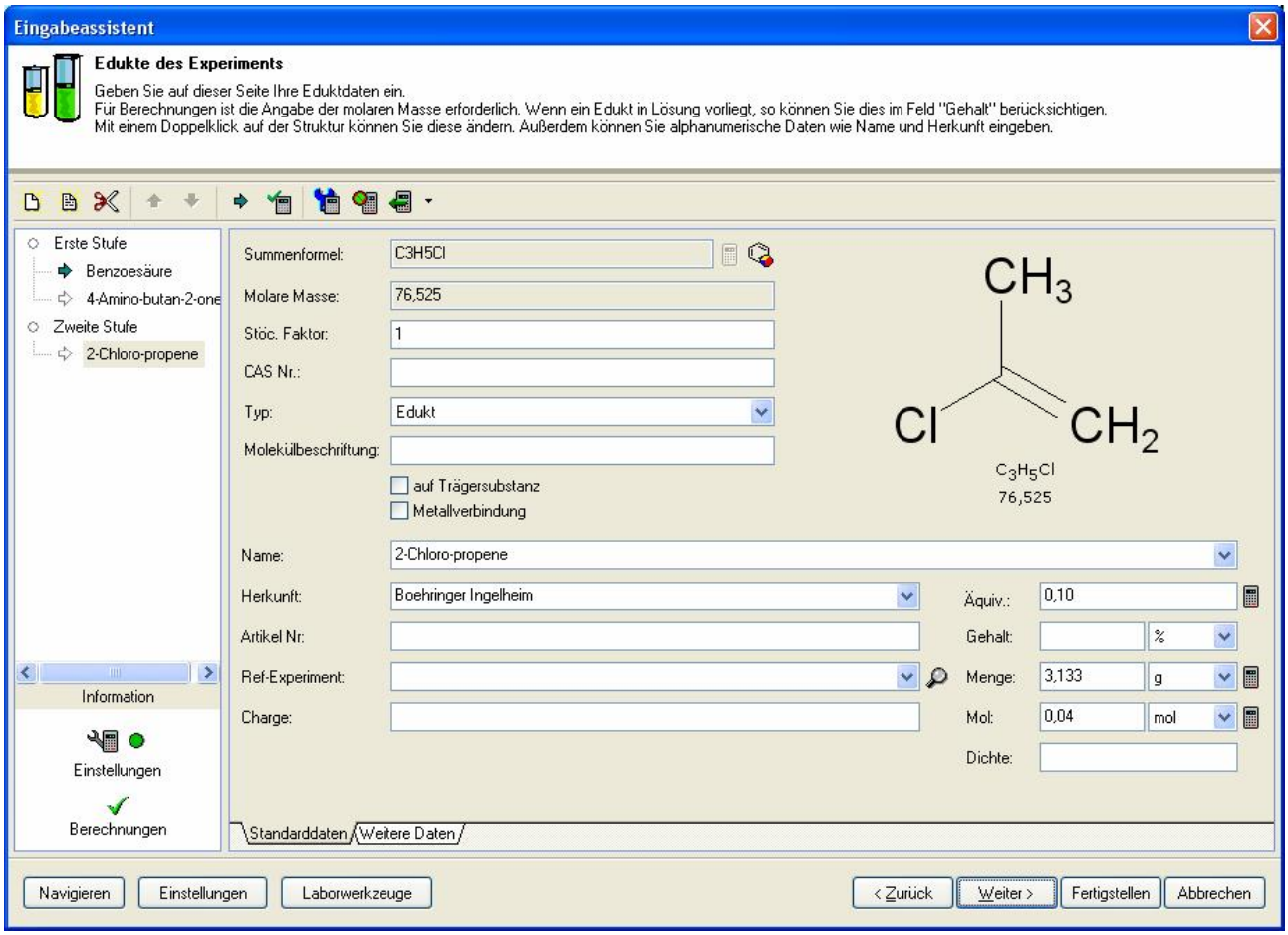

Vorgängerexperiment auswählen
Bitte wählen Sie aus der Liste mit verfügbaren Reaktionen die eine passende Produktstruktur beinhalten das gewünschte Experiment aus.
Die Reaktion wird der neu erzeugten Vorgängerstufe gesetzt und vorhandene Daten zur Reaktion werden ebenfalls übertragen.
Bitte wählen Sie den Auswahlfilter für Vorgängerexperimente:
Das Referenzedukt der ersten Stufe muss als Produkt in einem Experiment vorhanden sein
Geben Sie ein Experiment Nummern Maske an (die Struktur fungiert dennoch als primäres Kriterium)
Experimentnummer:
MMU_2010/06
beginnt mit
enthält
exakt
< Zurück
Weiter >
Auswählen
Abbrechen



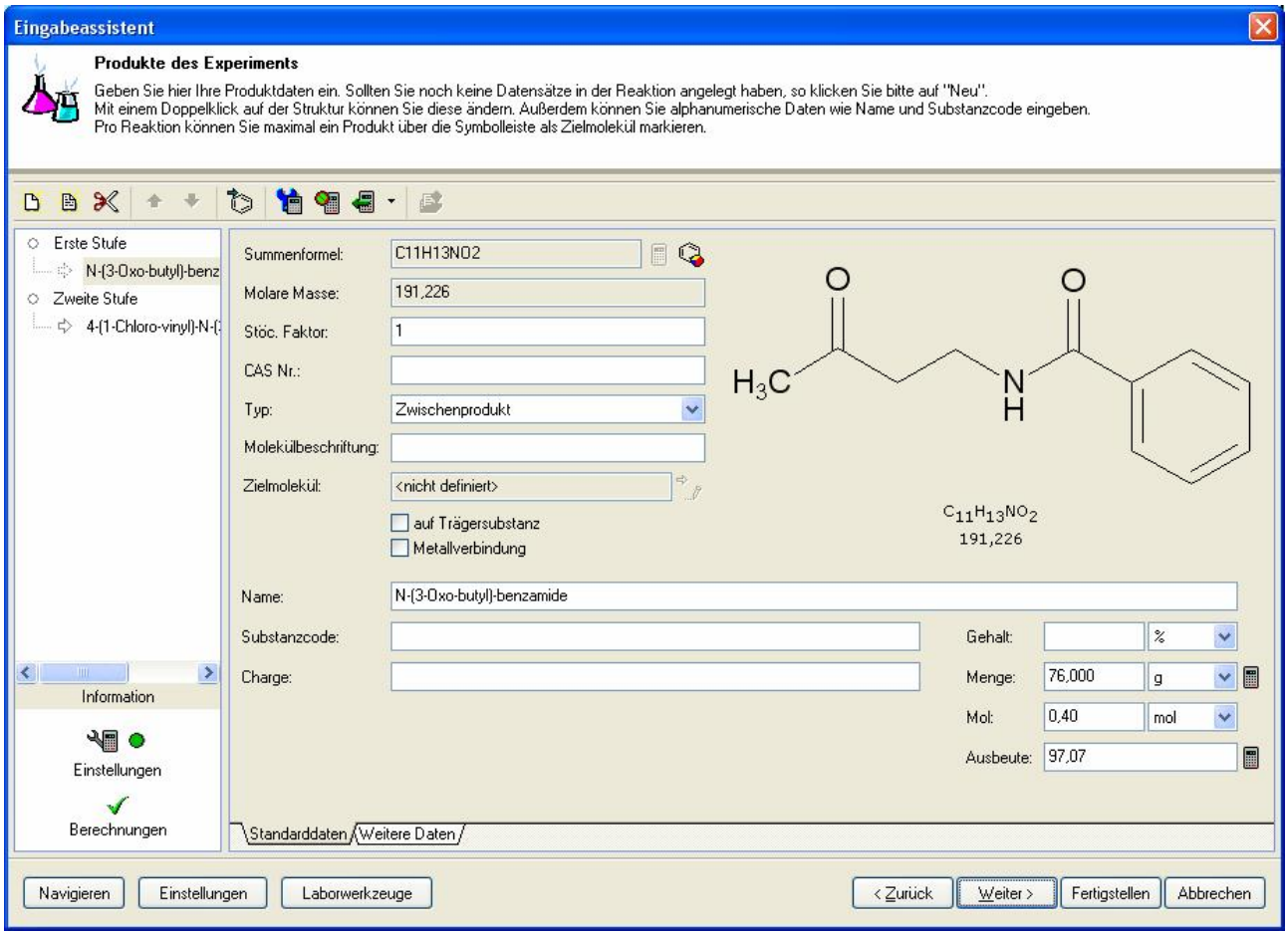
Sie wählen aus der Liste von verfügbaren Reaktionen die gewünschte aus und übernehmen damit die Reaktion selber und ggf. die Texte des Reaktionspfeiles in die neue Stufe. Bitte beachten Sie dass es sich lediglich um eine Datenübernahme handelt und derzeit noch keine Referenzen im Sinne von Verknüpfungen vorgenommen werden.

Nach der Eingabe von entsprechenden Stufen Reaktionen werden die Eingabeseiten für Edukte und Produkte im Assistenten um diese Information erweitert und bilden damit die Vorgänge für Sie als Anwender transparent ab.

Die Eingabe von Detaildaten erfolgt wie gewohnt, Berechnungen von Edukten erfolgen in Relation zum Referenz Edukt der ersten Stufe.



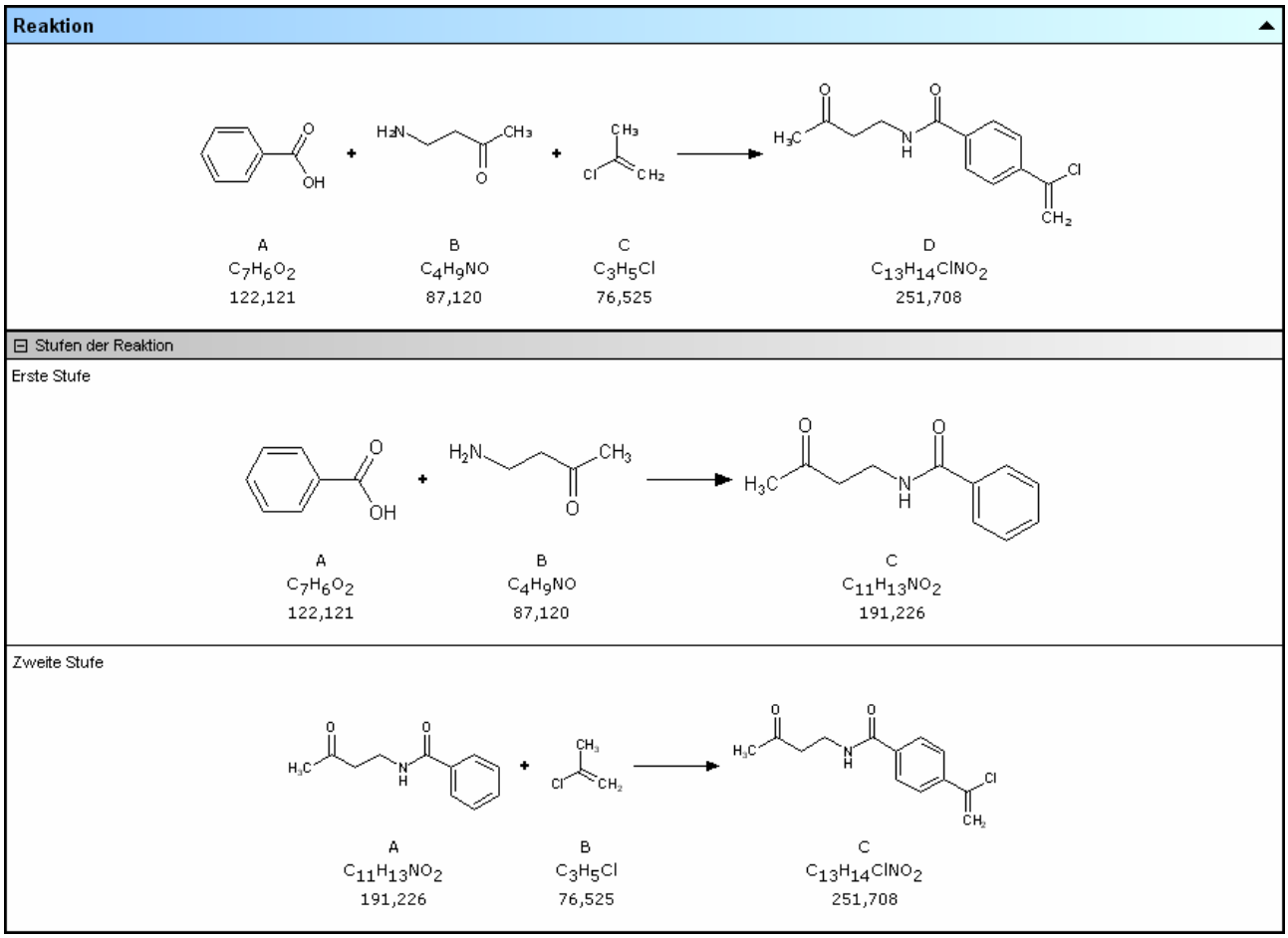
Die Zwischenprodukte tauchen auf der Eduktseite nicht auf sondern können lediglich in der Liste der Produkte bearbeitet werden. Auch hier werden die Stufen Informationen im Baum des Assistenten angezeigt.



Berechnungen der Ausbeute erfolgen ebenfalls in Relation zum Referenz Edukt der ersten Stufe. Alle Detail Daten werden auch hier wie gewohnt eingegeben.

15.3. Ansicht

In der Experiment Ansicht wird als Reaktionsschema die aus den Stufen resultierende Gesamtreaktion angezeigt. Durch aufklappen der Stufen Reaktionen werden auch die Zwischenschritte sichtbar und können z.B. in den Ausdruck mit aufgenommen werden.



Diese Ansicht stellt den ersten Schritt hin zu einer vollständigen Dokumentation von mehrstufigen Prozessen dar und wird in einer Folgeversion auch um die Möglichkeit z.B. Synthesepfade abzubilden erweitert.

15.4. Löschen

Sie haben die Möglichkeit einzelne Stufen oder aber die gesamte Mehrstufigkeit zu löschen. Wählen Sie hierzu die entsprechende Funktion aus dem Menu.

Der Befehl „Mehrstufigkeit löschen“ führt zur Beibehaltung der Gesamtreaktion durch Löschung aller Zwischenstufen Informationen, also Stufen Reaktion und Zwischenproduktdaten.

16. Datenaustausch mit CSV

Das CSV Dateiformat dient dem standardisierten Datenaustausch zwischen Programmen. Durch die entsprechenden Funktionen in ensochemLab können Sie so zum Beispiel Ihre tabellarische Versuchsbeschreibung als Tabelle in ein Word Dokument einfügen oder Ihre in Excel erfassten Versuchsergebnisse in Ihr Experiment in ensochemLab übernehmen.

16.1. Export von tabellarischen Daten nach CSV

ensochemLab bietet Ihnen an den Stellen, an denen tabellarische Daten verarbeitet oder erfasst werden, die Möglichkeit, diese in eine CSV-Datei zu exportieren. Konkret gibt es diese Funktion also bei:

- der tabellarischen Beschreibung
- den Reaktionsparametern
- dem Versuchsverlauf

Die Exportfunktion steht sowohl von der Experimentanzeige als auch vom Eingabeassistenten aus zur Verfügung. In der Anzeige finden Sie im Kontextmenü den Befehl „<ELEMENT> exportieren“ (<ELEMENT> steht dabei für den Experimentteil, den Sie gerade betrachten), im Eingabeassistenten gibt es in der Symbolleiste einen Knopf „Exportieren“. Es erscheint in beiden Fällen der folgende Dialog:

Beschreibung exportieren
In CSV-Datei exportieren
Bitte wählen sie einen Dateinamen aus, indem sie auf den Knopf an der rechten Seite des Eingabefelds klicken.
Außerdem können sie die gewünschten Eigenschaften ihrer CSV-Datei wie Trenner und Begrenzer angeben.
Um die Datei zu speichern, klicken sie bitte auf "OK". Mit einem Klick auf "Abbrechen" können sie den Vorgang abbrechen.
Dateiname:
Trenner:
Tabulator
Semikolon
Komma
Leerzeichen
Anderer:
Begrenzer:
"
OK
Abbrechen

Der erste Schritt besteht nun darin, einen Dateinamen für den Export anzugeben. Klicken Sie hierfür auf den Knopf „Speichern unter“. Das Programm zeigt nun einen normalen „Speichern“ Dialog an, wie Sie ihn von vielen anderen Windows-Programmen kennen.

Im unteren Teil des Exportfensters können Sie die gewünschten Einstellungen für Ihre CSV Datei festlegen. Der „Trenner“ dient hierbei als Trennzeichen zwischen zwei Feldern innerhalb der Datei:

```
Menge,Einheit
12,g
```

Der „Begrenzer“ schließt einen Feldinhalt links und rechts ein. Dies ist speziell dann wichtig, wenn der „Trenner“ in den Felddaten enthalten ist:

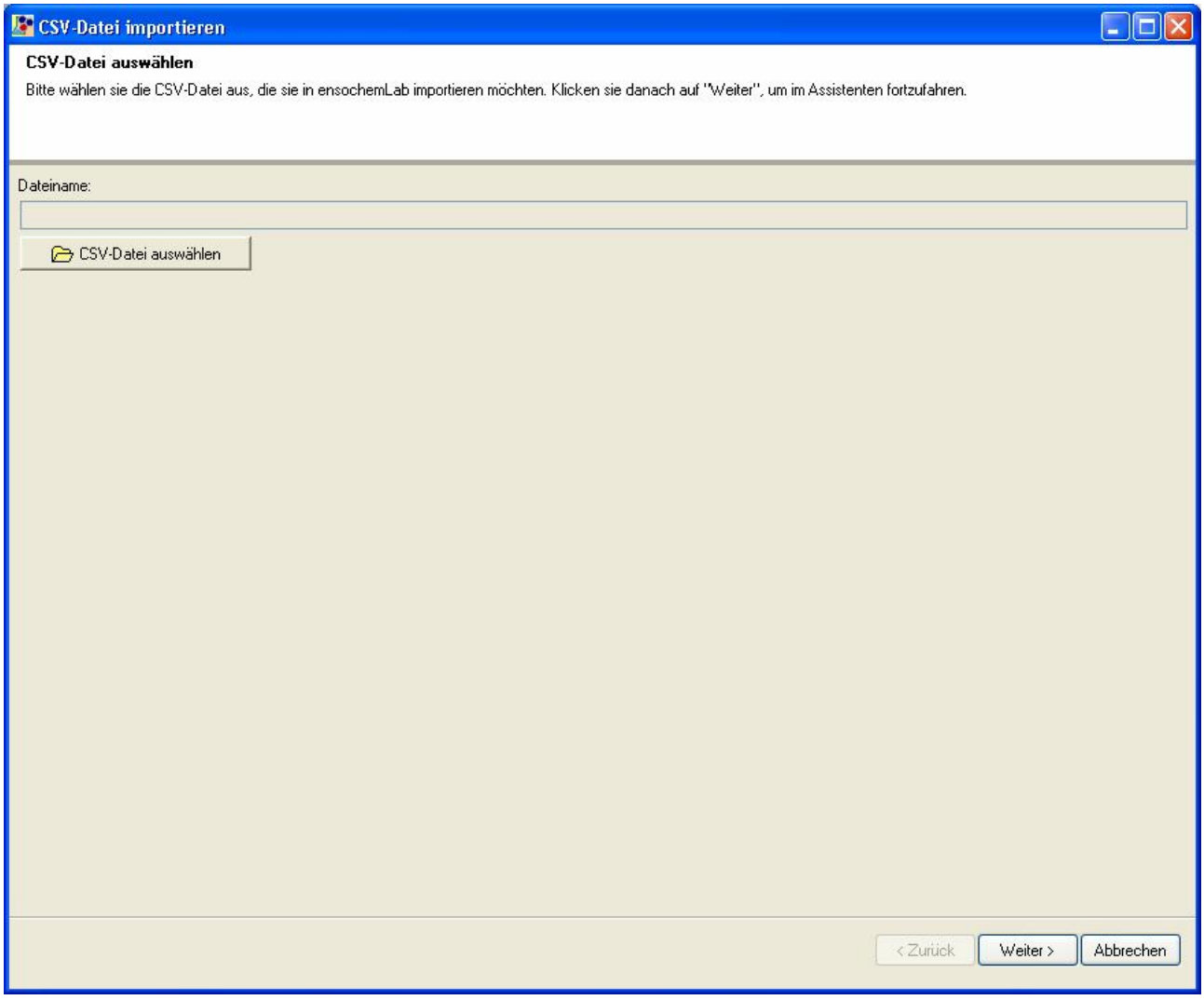
```
Name,Kommentar
„Meier,Peter“,“Temperatur um 5 °C erhöht“
```

Um Ihren Export zu beginnen, klicken Sie bitte auf „OK“. Mit „Abbrechen“ kehren Sie zum vorherigen Modul zurück, ohne Ihre Exportdatei zu erstellen.

16.2. Import von tabellarischen Daten aus CSV

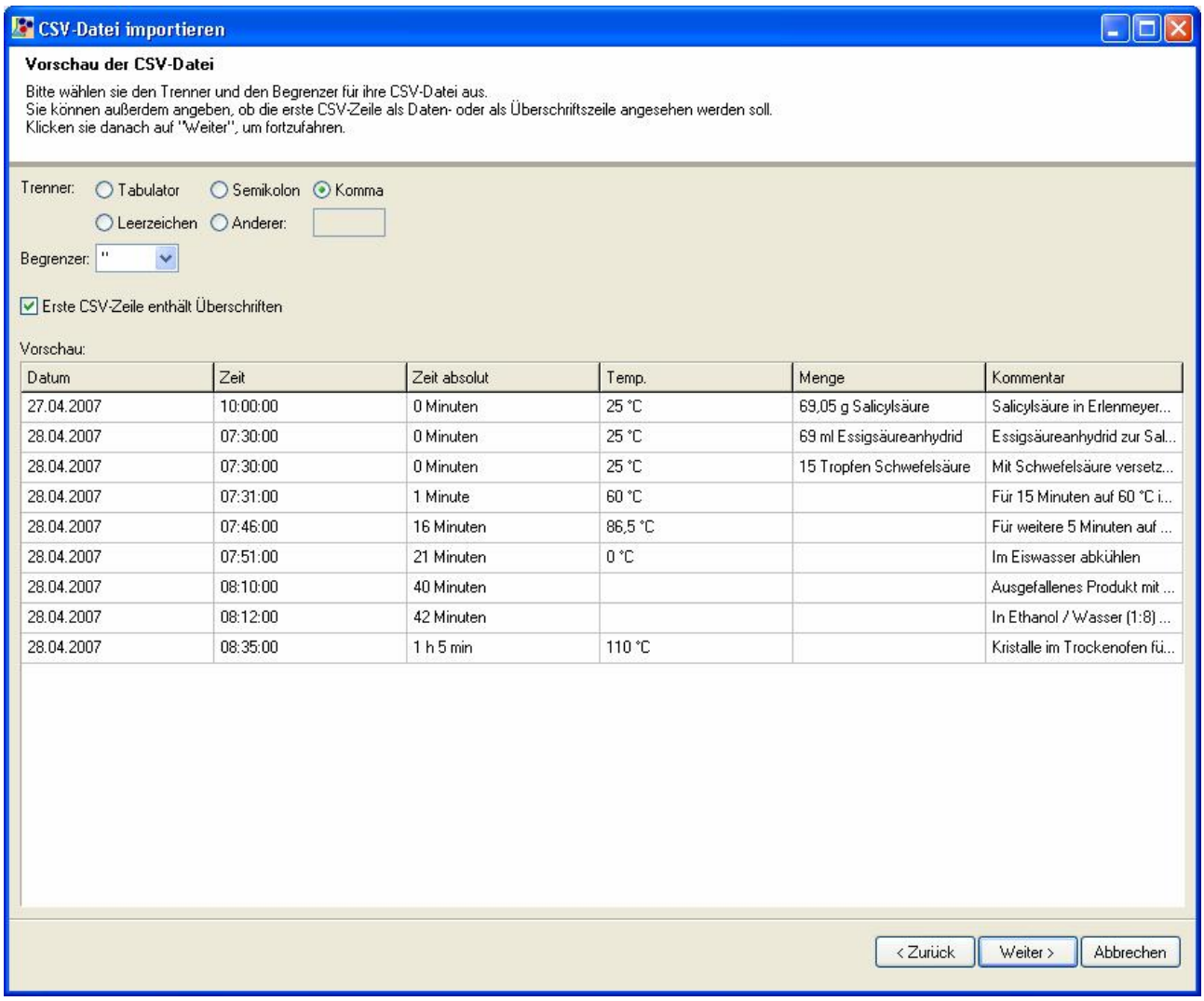
An jeder der in Abschnitt 1 genannten Stellen können Sie Ihre extern bearbeiteten CSV-Daten natürlich auch wieder importieren. Der Ablauf ist an allen diesen Stellen gleich und führt auch zum gleichen Importassistenten. Bitte beachten Sie, dass die bereits bestehenden Eingaben immer von den importierten Daten überschrieben werden.

Um in den Importassistenten zu gelangen, klicken Sie bitte auf den Befehl „Importieren“ in der Symbolleiste des jeweiligen Moduls. Der folgende Dialog erscheint:


CSV-Datei importieren
CSV-Datei auswählen
Bitte wählen sie die CSV-Datei aus, die sie in ensochemLab importieren möchten. Klicken sie danach auf "Weiter", um im Assistenten fortzufahren.
Dateiname:
CSV-Datei auswählen
< Zurück
Weiter >
Abbrechen

Auf der ersten Seite des Assistenten können Sie die zu importierende Datei auswählen, indem Sie auf „CSV Datei auswählen“ klicken. Alternativ dazu können Sie auch eine Datei aus dem Windows Explorer in das Fenster ziehen.

Danach können Sie mit „Weiter“ zur nächsten Seite des Assistenten fortfahren.


CSV-Datei importieren
Vorschau der CSV-Datei
Bitte wählen sie den Trenner und den Begrenzer für ihre CSV-Datei aus.
Sie können außerdem angeben, ob die erste CSV-Zeile als Daten- oder als Überschriftszeile angesehen werden soll.
Klicken sie danach auf "Weiter", um fortzufahren.
Trenner: Tabulator Semikolon Komma
Leerzeichen Anderer:
Begrenzer: "
Erste CSV-Zeile enthält Überschriften
Vorschau:
Datum | Zeit | Zeit absolut | Temp. | Menge | Kommentar
27.04.2007 | 10:00:00 | 0 Minuten | 25 °C | 69,05 g Salicylsäure | Salicylsäure in Erlenmeyer...
28.04.2007 | 07:30:00 | 0 Minuten | 25 °C | 69 ml Essigsäureanhydrid | Essigsäureanhydrid zur Sal...
28.04.2007 | 07:30:00 | 0 Minuten | 25 °C | 15 Tropfen Schwefelsäure | Mit Schwefelsäure versetz...
28.04.2007 | 07:31:00 | 1 Minute | 60 °C | | Für 15 Minuten auf 60 °C i...
28.04.2007 | 07:46:00 | 16 Minuten | 86,5 °C | | Für weitere 5 Minuten auf ...
28.04.2007 | 07:51:00 | 21 Minuten | 0 °C | | Im Eiswasser abkühlen
28.04.2007 | 08:10:00 | 40 Minuten | | | Ausgefallenes Produkt mit ...
28.04.2007 | 08:12:00 | 42 Minuten | | | In Ethanol / Wasser (1:8) ...
28.04.2007 | 08:35:00 | 1 h 5 min | 110 °C | | Kristalle im Trockenofen fü...
< Zurück
Weiter >
Abbrechen

Auf dieser Seite sehen Sie eine Vorschau der Daten in Ihrer CSV Datei.

Diese Anzeige kann jedoch zunächst etwas seltsam aussehen:

Spalte 1
Datum,Zeit,Zeit absolut,Temp.,Menge,Kommentar
27.04.2007,10:00:00,0 Minuten,25 °C,69,05 g Salicylsäure,Salicylsäure in Erlenmeyerkolben geben
28.04.2007,07:30:00,0 Minuten,25 °C,69 ml Essigsäureanhydrid,Essigsäureanhydrid zur Salicylsäure geben
28.04.2007,07:30:00,0 Minuten,25 °C,15 Tropfen Schwefelsäure,Mit Schwefelsäure versetzen und umschütteln

Wenn dies geschieht, müssen Sie die Einstellungen im oberen Teil der Seite verändern. Sie legen fest, wie die CSV Daten verarbeitet werden sollen. Im Beispiel ist sichtbar, dass die Daten jeweils durch Kommas getrennt sind. Der „Trenner“ muss daher also auf „Komma“ gestellt werden. Die Vorschau sieht nun schon etwas besser aus:

Spalte 1	Spalte 2	Spalte 3	Spalte 4	Spalte 5	Spalte 6
Datum	Zeit	Zeit absolut	Temp.	Menge	Kommentar
27.04.2007	10:00:00	0 Minuten	25 °C	69,05 g Salicylsäure	Salicylsäure in Erlenmeyer...
28.04.2007	07:30:00	0 Minuten	25 °C	69 ml Essigsäureanhydrid	Essigsäureanhydrid zur Sal...
28.04.2007	07:30:00	0 Minuten	25 °C	15 Tropfen Schwefelsäure	Mit Schwefelsäure versetz...

Ein Problem gibt es aber noch immer: Die erste Zeile enthält keine Daten, sondern Spaltenüberschriften. Sie können dies mit der Option „Erste CSV Zeile enthält Überschriften“ dem Programm mitteilen. Daraufhin wird das für dieses Beispiel korrekte Ergebnis angezeigt:

Datum	Zeit	Zeit absolut	Temp.	Menge	Kommentar
27.04.2007	10:00:00	0 Minuten	25 °C	69,05 g Salicylsäure	Salicylsäure in Erlenmeyer...
28.04.2007	07:30:00	0 Minuten	25 °C	69 ml Essigsäureanhydrid	Essigsäureanhydrid zur Sal...
28.04.2007	07:30:00	0 Minuten	25 °C	15 Tropfen Schwefelsäure	Mit Schwefelsäure versetz...

Betrachten wir noch ein anderes Beispiel:

Spalte 1
Datum,Zeit,Zeit absolut,Temp.,Menge,Kommentar
27.04.2007,10:00:00,0 Minuten,25 °C,69,05 g Salicylsäure,ein Kommentar, hier mit Komma

Wie Sie bereits wissen, muss hier der „Trenner“ auf „Komma“ gesetzt und die Option zum Ausblenden der Überschriften aktiviert werden. Danach zeigt sich jedoch das folgende Problem:

"Datum"	'Zeit"	'Zeit absolut"	"Temp."	"Menge"	"Kommentar"	Spalte 7	Spalte 8
"27.04.2007"	"10:00:00"	"0 Minuten"	"25 °C"	"69	05 g Salicylsäure"	"ein Kommentar	hier mit Komma

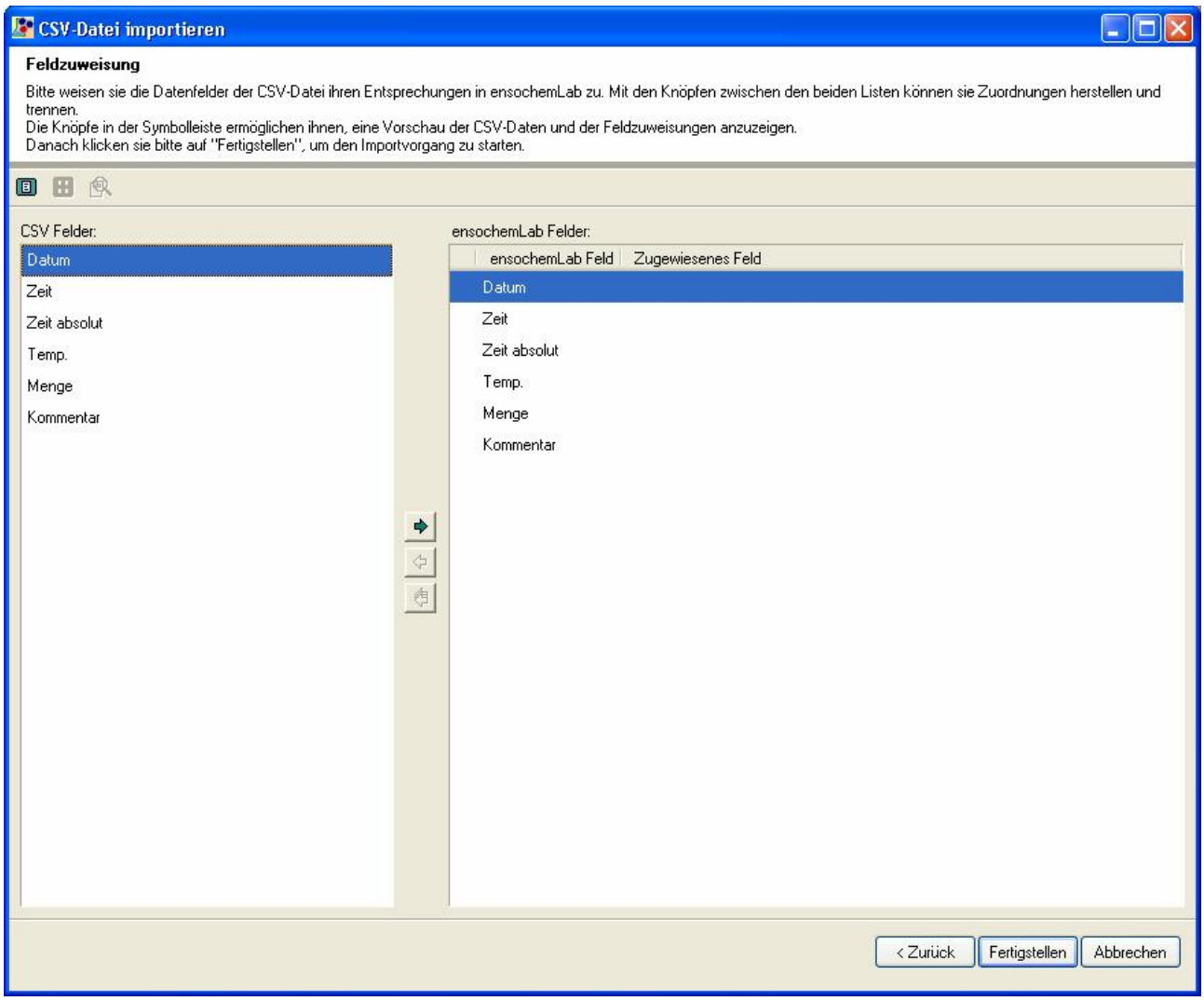
Die letzten beiden Spalten enthalten einen Text, der eigentlich Inhalt einer Spalte ist. Da im Text jedoch ein Komma vorkommt und wir dieses als Trennzeichen markiert haben, wird der Text auf zwei Spalten verteilt. Die Lösung liegt in der Betrachtung der Anführungszeichen vor der ersten und nach der zweiten Spalte. Wenn wir diese als „Begrenzer“ einstellen, fasst dass Programm alle Daten innerhalb der Anführungszeichen automatisch zu einer einzigen Spalte zusammen:

Datum	Zeit	Zeit absolut	Temp.	Menge	Kommentar
27.04.2007	10:00:00	0 Minuten	25 °C	69,05 g Salicylsäure	ein Kommentar, hier mit Komma

Wenn Sie die CSV Datei selbst exportiert haben, geben Sie bitte einfach die gleichen Einstellungen wie beim Export an. Andernfalls können Sie anhand der oben beschriebenen Regeln oftmals mit nur einem oder zwei Versuchen die korrekten Daten ermitteln.

Nachdem Sie die Importoptionen korrekt festgelegt haben und die Vorschau Ihren Erwartungen entspricht, klicken Sie bitte auf „Weiter“, um im Assistenten fortzufahren.

Die nächste Seite sieht so aus:



Auf dieser Seite müssen die Felder in Ihrer CSV Datei den entsprechenden ensochemLab Datenfeldern zugeordnet werden.

Das Programm versucht, diese Zuordnung automatisch anhand der Spaltennamen vorzunehmen. Dies funktioniert natürlich nur, wenn Sie auf der vorherigen Seite angegeben haben, dass die erste Zeile die Überschriften enthält. Andernfalls nummeriert ensochemLab die Spalten anhand des Schemas „Spalte 1“, „Spalte 2“ usw. durch, ohne Informationen über den Inhalt zu besitzen.
Eine weitere Bedingung für die automatische Zuordnung ist, dass die Spaltennamen den Datenfeldnamen (im Programm, nicht in der Datenbank selbst) von ensochemLab entsprechen. Dies ist bei allen von der Software selbst exportierten Dateien der Fall, für vollständig selbst erstellte CSV Dateien können Sie entweder die korrekten Namen angeben oder die Zuordnung auf dieser Seite manuell vornehmen.

Wenn Sie für die manuelle Zuordnung den Inhalt Ihrer CSV Datei noch einmal sehen möchten, klicken Sie bitte auf den Befehl „Vorschau der CSV Datei“ in der Symbolleiste. In einem gesonderten Fenster erhalten Sie nun die gleiche Vorschau, die Sie auch auf der Seite zuvor gesehen haben.

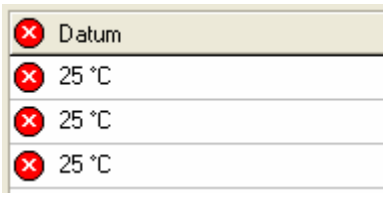
Wichtig:	Verwenden Sie nicht den „Zurück“ Knopf des Importassistenten, wenn Sie nur die Vorschau noch einmal sehen möchten. Wenn Sie dies tun, werden alle bereits vorgenommenen Zuordnungen gelöscht!

Um ein Feld zuzuordnen, wählen Sie es bitte in der Liste auf der linken Seite aus. Danach können Sie auf zwei Arten vorgehen: Sie können das Feld entweder per Drag & Drop auf das korrekte ensochemLab Feld in der liste auf der rechten Seite ziehen oder Sie können das gewünschte Zielfeld selektieren und dann auf „Zuweisen“ klicken. Bei beiden Methoden wird das CSV Feld nun neben dem zugeordneten ensochemLab Datenfeld in der Liste auf der rechten Seite angezeigt.

Um eine Zuweisung zu entfernen, können Sie den gewünschten Tabelleneintrag entweder wieder per Drag & Drop zurück in die linke Liste ziehen, oder Sie können ihn auswählen und danach auf „Zuweisung des ausgewählten ensochemLab Felds entfernen“ klicken.
"
Um alle Zuweisungen zu entfernen, klicken Sie bitte einfach auf „Zuweisungen aller ensochemLab Felder löschen“.

In einer CSV Datei können per Definition alle Datenfelder beliebige Daten aufnehmen. So könnte ein Feld für eine Temperatur auch den Text „drei Grad“ enthalten. In ensochemLab hingegen sind die Datenfelder jedoch von einem festen Typ, d.h. einige Felder können nur Zahlen, andere nur Datumswerte enthalten. Aus diesem Grund würde das Beispiel „drei Grad“ bei einem Zahlenfeld zu einem Importierungsfehler führen.
Bei der Zuordnung der Datenfelder können Sie diese Fehler bereits im Voraus sehen. Können ein oder mehrere Datensätze nicht importiert werden, sehen Sie in der ersten Spalte der Zuordnungstabelle in rotes X. Wenn Sie die Maus über ein solches Symbol bewegen, wird ein Informationsfenster mit der Anzahl der nicht importierbaren Datensätze angezeigt. Sind dies alle Datensätze der Datei, ist das Feld dem falschen ensochemLab Datenfeld zugeordnet worden. Bitte überprüfen Sie in diesem Fall den Inhalt Ihrer CSV Datei und die festgelegten Zuordnungen.

Um nähere Details zu einem solchen Problem zu erfahren, können Sie die Funktion „Vorschau der ausgewählten Felder der CSV-Datei“ verwenden. Sie zeigt den bereits bekannten Vorschaudialog an, diesmal jedoch nur mit dem Feld der aktuell ausgewählten Zuordnung. Zeilen mit Importierungsfehlern werden dabei mit einem Symbol gekennzeichnet. So ist im folgenden Beispiel zu sehen, dass dem Datumsfeld irrtümlich die Temperatur zugewiesen wurde.



Wenn Sie alle zugeordneten Datenfelder sehen möchten, klicken Sie bitte auf „Vorschau aller zugewiesenen Felder in der CSV Datei“. Der Vorschaudialog erscheint erneut und enthält nun nicht nur eine Spalte, sondern alle bereits zugewiesenen Spalten der CSV Datei. Auch hier werden fehlerhafte Zellen gekennzeichnet:

Zeit	Temp.
27.04.2007	25 °C
28.04.2007	25 °C
28.04.2007	25 °C

Den genauen Fehlertext für jeden einzelnen Datensatz erhalten Sie, wenn Sie die Maus über ein solches Symbol in einer der Datenansichten halten.

Ein Fehlersymbol in einer Spaltenüberschrift zeigt an, dass mindestens ein Datensatz einen Fehler in dieser Spalte enthält.

Wenn Sie mit den Zuordnungen zufrieden sind, klicken Sie bitte auf „Fertigstellen“, um die Daten zu übernehmen. Falls zu diesem Zeitpunkt noch Fehler auftreten, wird ein Dialog angezeigt, in dem Sie entscheiden können, wie mit solchen Datensätzen zu verfahren ist:

Ungültige CSV-Importdaten
Der Importassistent hat festgestellt, dass einige Datensätze ungültig sind und nicht importiert werden können.
Bitte entscheiden sie, wie sie mit diesen Datensätzen verfahren möchten.
Importieren abbrechen.
Bricht den Importvorgang ab und kehrt zum Importassistenten zurück.
Leere Datensätze überspringen.
Behandelt alle ungültigen Feldinhalte als leere Datenfelder und ignoriert alle Datensätze mit ausschließlich leeren Feldern.
Ungültige Datensätze überspringen.
Überspringt Datensätze mit ungültigen Feldinhalten.
Vorschau anzeigen
Fortfahren

Sie können den Importvorgang abbrechen und zu Assistenten zurückkehren, um die Zuordnungen noch einmal zu ändern und es erneut zu versuchen. Außerdem können Sie das Programm alle ungültigen Datensätze (Zellen in der CSV Datei) überspringen lassen. Solche Daten werden dann als Leereinträge angesehen. Die dritte Option ermöglicht Ihnen, Datenzeilen mit Fehlen ganz zu überspringen, also auch die restlichen Spalten nicht zu importieren.

Auch hier steht Ihnen noch einmal eine Vorschau Ihrer CSV Datei zu Verfügung. Der Modus entspricht der Anzeige aller zugewiesenen ensochemLab Datenfelder.

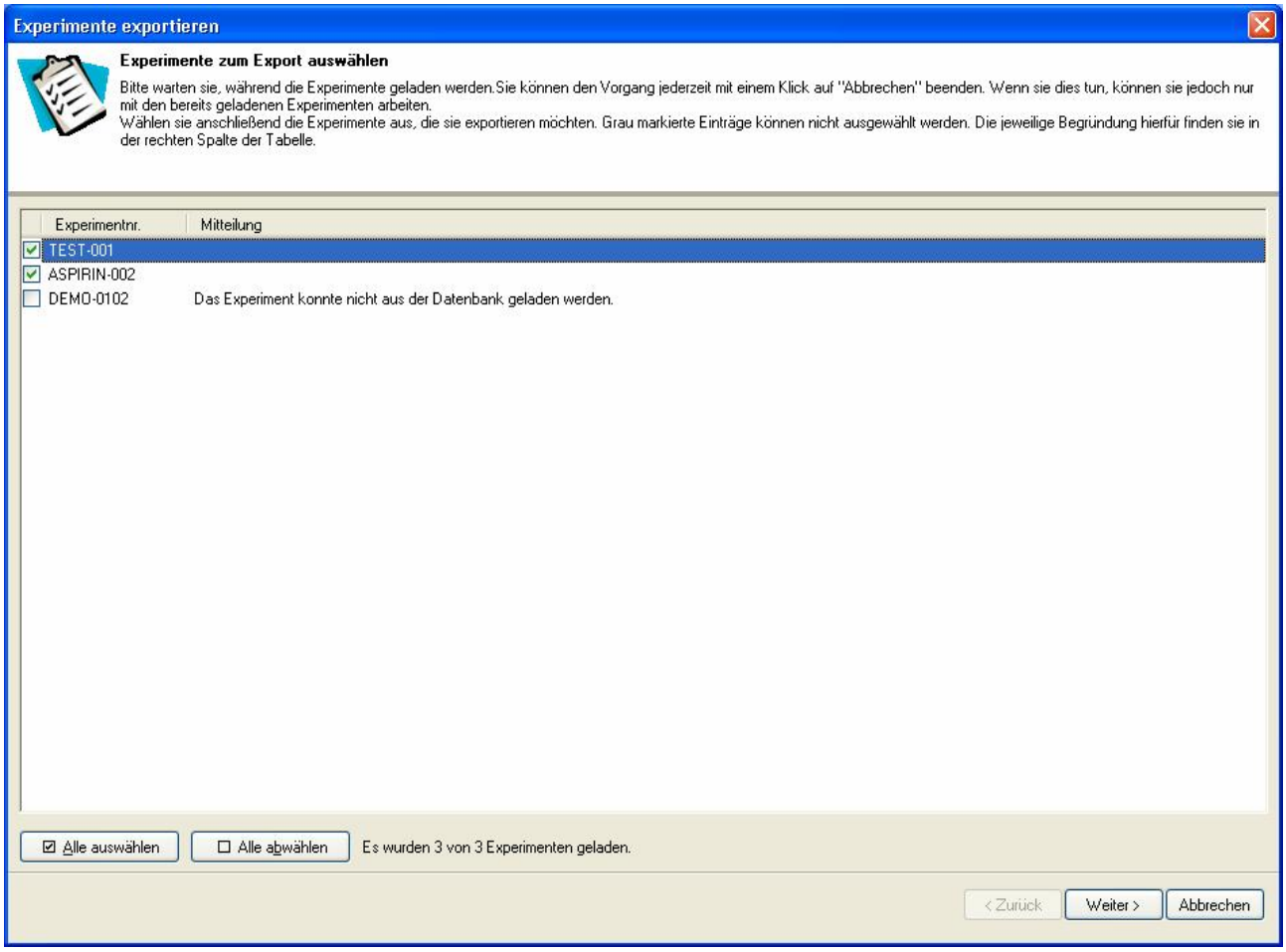
Mit einem Klick auf „Fortfahren“ wenden Sie die gewählte Vorgehensweise an.

Der Importassistent wird nun geschlossen und Sie kehren zu dem Modul zurück, von dem aus Sie ihn gestartet haben. Dort finden Sie auch die importierten Daten, die Sie entweder direkt übernehmen oder per Hand nachbearbeiten können.

16.3. Export von Experimentdaten nach CSV

Mit dieser Funktion können Sie die Daten der Edukte und Produkte Ihrer Experimente in eine CSV-Datei exportieren. Eine Datei kann dabei jedoch nur wahlweise entweder Edukt- oder Produktdaten enthalten, diese aber von beliebig vielen Experimenten beziehen. Der Export anderer Experimentdaten (z.B. Kopfdaten) ist nicht möglich.

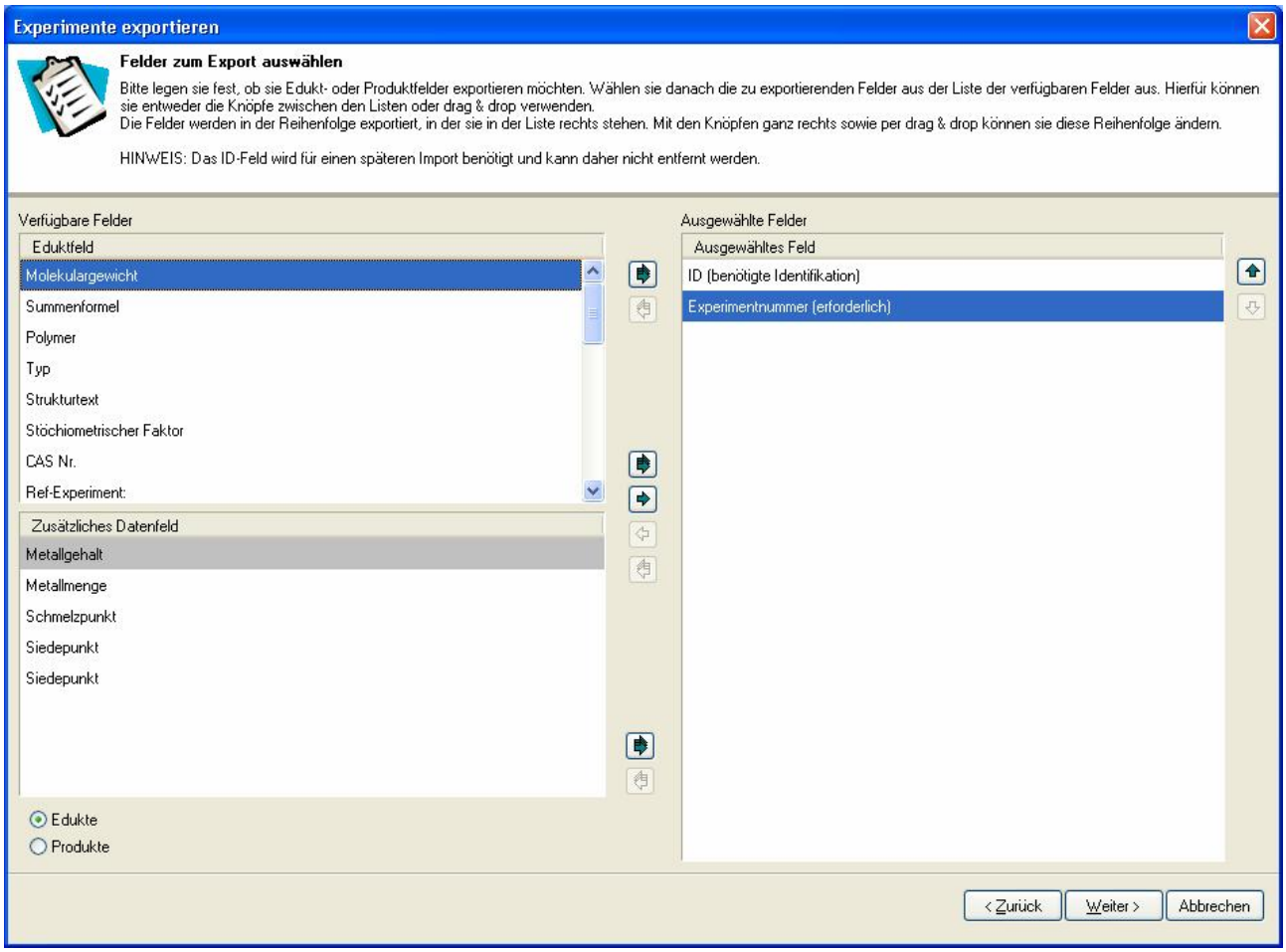
Bitte wählen Sie zuerst den gewünschten Ordner im Navigator des Hauptfensters aus. Sie können auch einfach ein Experiment in diesem Ordner anwählen. Klicken Sie anschließend im Hauptmenü unter „Liste“ auf „Experimente exportieren“. Der folgende Dialog erscheint:


Experimente exportieren
Experimente zum Export auswählen
Bitte warten sie, während die Experimente geladen werden.Sie können den Vorgang jederzeit mit einem Klick auf "Abbrechen" beenden. Wenn sie dies tun, können sie jedoch nur mit den bereits geladenen Experimenten arbeiten.
Wählen sie anschließend die Experimente aus, die sie exportieren möchten. Grau markierte Einträge können nicht ausgewählt werden. Die jeweilige Begründung hierfür finden sie in der rechten Spalte der Tabelle.
Experimentnr.
Mitteilung
TEST-001
ASPIRIN-002
DEMO-0102
Das Experiment konnte nicht aus der Datenbank geladen werden.
Alle auswählen
Alle abwählen
Es wurden 3 von 3 Experimenten geladen.
< Zurück
Weiter >
Abbrechen

In der Liste sehen Sie alle Experimente des aktuellen Ordners. Experimente, die nicht exportiert werden können, werden grau angezeigt und können nicht ausgewählt werden. In der zweiten Spalte der Tabelle sehen Sie in einem solchen Fall die entsprechende Begründung.

Bitte kreuzen Sie die Experimente, die Sie exportieren möchten, an. Mit den beiden Knöpfen „Alle auswählen“ und „Alle abwählen“ können Sie die Haken bei allen Elementen setzen bzw. entfernen.

Nachdem Sie Ihre Auswahl getroffen haben, klicken Sie bitte auf „Weiter“.


Experimente exportieren
Felder zum Export auswählen
Bitte legen sie fest, ob sie Edukt- oder Produktfelder exportieren möchten. Wählen sie danach die zu exportierenden Felder aus der Liste der verfügbaren Felder aus. Hierfür können sie entweder die Knöpfe zwischen den Listen oder drag & drop verwenden.
Die Felder werden in der Reihenfolge exportiert, in der sie in der Liste rechts stehen. Mit den Knöpfen ganz rechts sowie per drag & drop können sie diese Reihenfolge ändern.
HINWEIS: Das ID-Feld wird für einen späteren Import benötigt und kann daher nicht entfernt werden.
Verfügbare Felder
Eduktfeld
Molekulargewicht
Summenformel
Polymer
Typ
Strukturtext
Stöchiometrischer Faktor
CAS Nr.
Ref-Experiment:
Zusätzliches Datenfeld
Metallgehalt
Metallmenge
Schmelzpunkt
Siedepunkt
Siedepunkt
Ausgewählte Felder
Ausgewähltes Feld
ID (benötigte Identifikation)
Experimentnummer (erforderlich)
Edukte
Produkte
< Zurück
Weiter >
Abbrechen

Auf dieser Seite können Sie die zu exportierenden Felder auswählen. Bitte entscheiden Sie hierbei zuerst, ob Sie Edukt- oder Produktdaten exportieren möchten und wählen Sie den entsprechenden Eintrag links unterhalb der beiden Listen aus.
Sie sollten diese Aktion zuerst durchführen, da bei einem späteren Wechsel die bereits gewählten Exportfelder verloren gehen. Ein gleichzeitiger Export von Edukt- und Produktdaten in eine gemeinsame Datei ist, wie bereits eingangs erwähnt, nicht möglich.

Die Bilder in diesem Handbuch zeigen den Export von Eduktdaten.

Die Liste links oben zeigt alle Datenfelder des ausgewählten Bereichs (Edukte oder Produkte). Darunter sehen Sie alle vom Administrator definierten zusätzlichen Datenfelder. Rechts befindet sich die Liste der zu exportierenden Datenfelder.
Um ein Feld in die Exportliste aufzunehmen, können Sie es entweder per Drag & Drop in die rechte Liste ziehen, oder es links auswählen und dann auf „Ausgewähltes Feld hinzufügen“ klicken. Der gleiche Befehl steht Ihnen auch über das Kontextmenü zur Verfügung.
Sie können ein Feld aus der Exportliste entfernen, indem Sie es per Drag & Drop zurück nach links ziehen. Die aktuelle Auswahl wird mit dem Knopf „Aktuelles Feld entfernen“ oder dem entsprechenden Eintrag im Kontextmenü entfernt.

Um alle Edukt- bzw. Produktfelder hinzuzufügen, können Sie den Knopf „Alle Eduktfelder hinzufügen“ bzw. „Alle Produktfelder hinzufügen“ verwenden. Der umgekehrte Weg ist über „Alle Eduktfelder entfernen“ bzw. „Alle Produktfelder entfernen“ möglich. Die beiden Schalter befinden sich oben zwischen den beiden Listen.

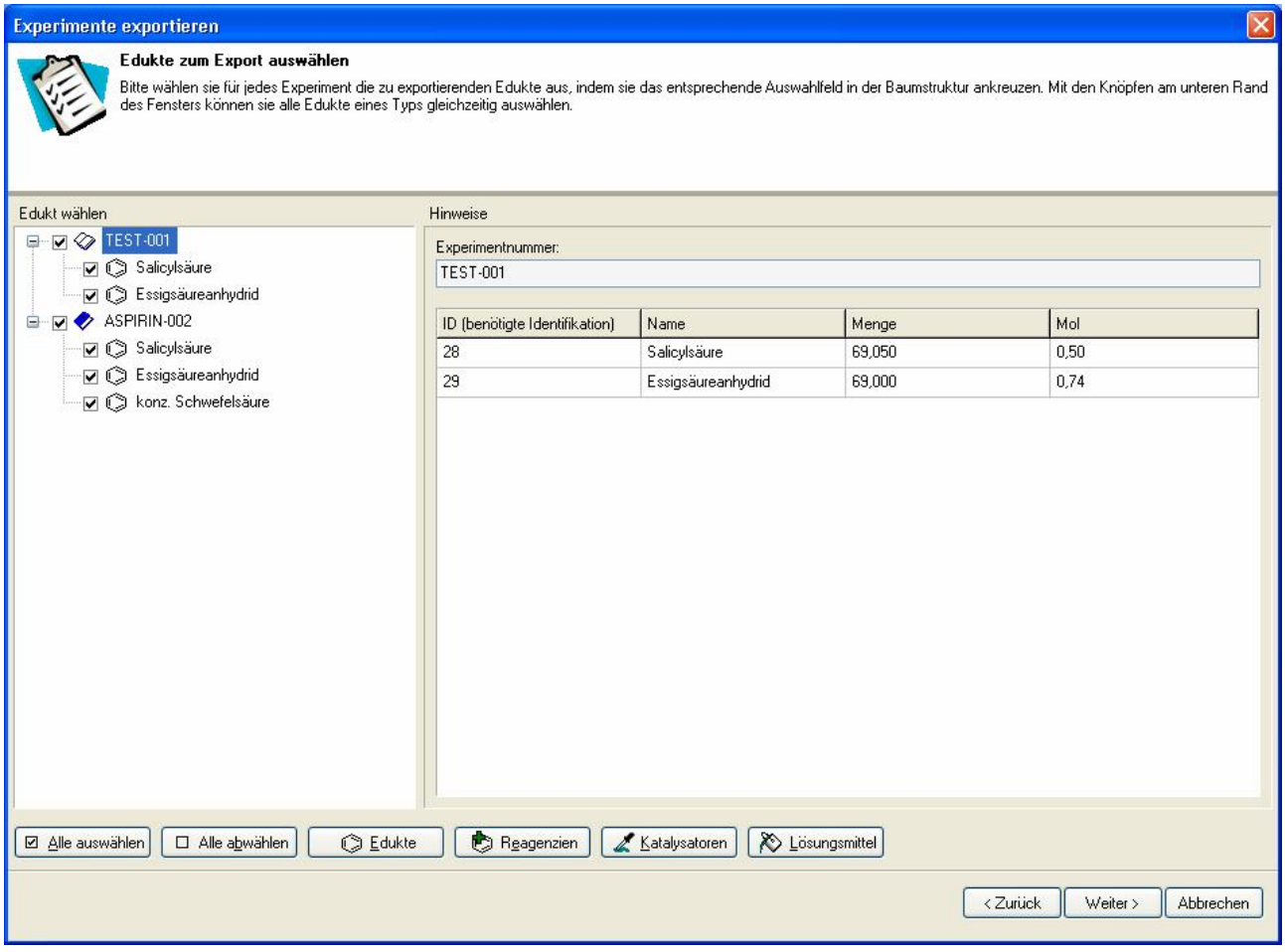
Wie Sie sehen, befinden sich Schalter mit dem gleichen Symbol auch in der Mitte bzw. unten zwischen den Listen. Die Begründung hierfür ist, dass die Funktionen, die sich oben neben der Liste der Edukt- bzw. Produktfelder befinden, auch nur für diese gelten. Die Knöpfe neben der Liste der zusätzlichen Datenfelder betreffen damit analog auch nur die zusätzlichen Daten.

Wenn Sie wirklich alle Datenfelder unabhängig von der jeweiligen Kategorie exportieren möchten, verwenden Sie bitte die „Alle hinzufügen“ bzw. „Alle entfernen“ Schalter in der Mitte.

Um die Reihenfolge, in der die Felder später in der Datei auftreten sollen, zu ändern, können Sie die Felder in der rechten Liste per Drag & Drop vertauschen. Ziehen Sie das entsprechende Feld einfach an die gewünschte Position. Natürlich können Sie auch die Knöpfe „Nach oben“ und „Nach unten“ rechts neben der Liste verwenden.

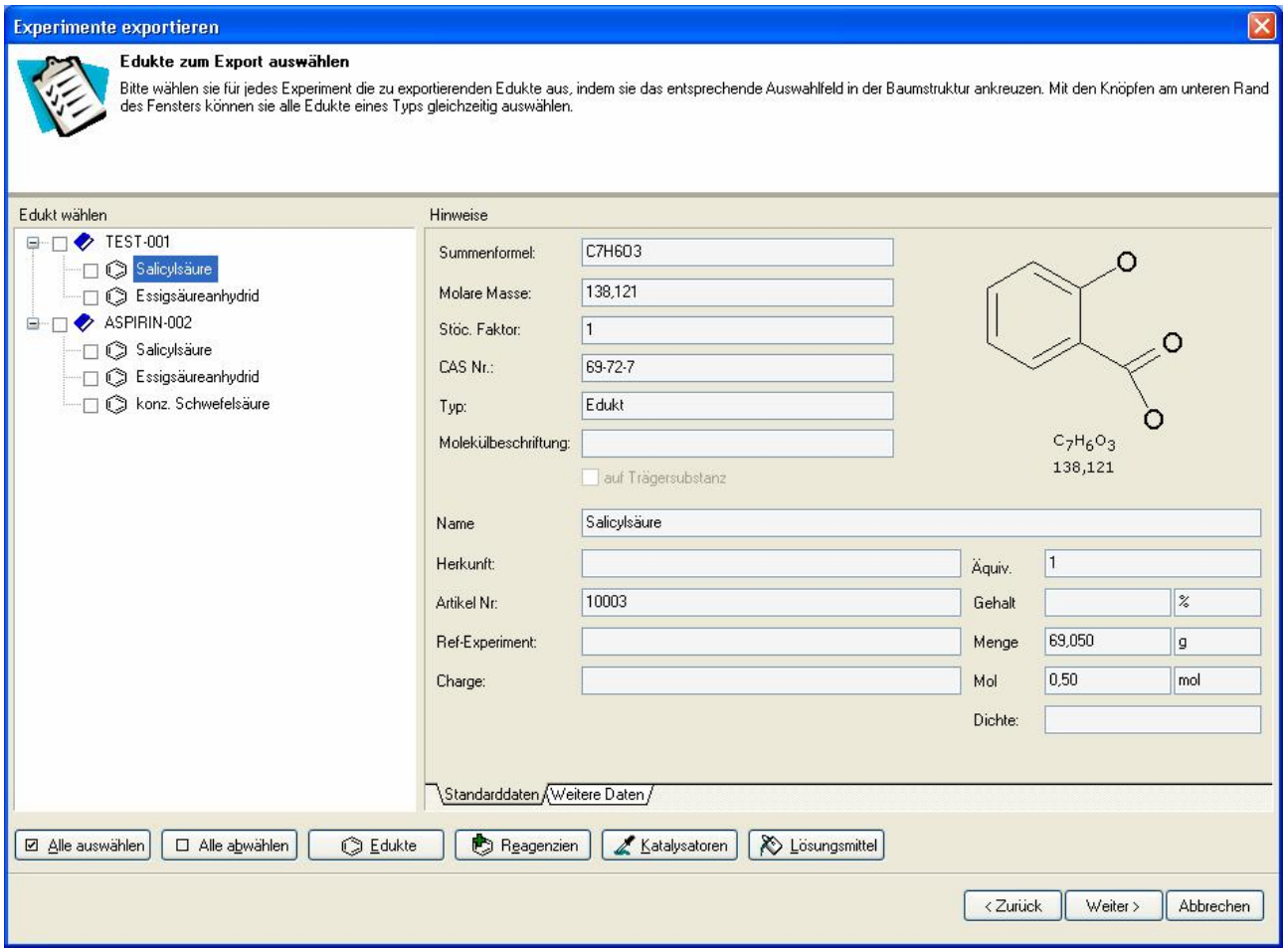
ensochemLab exportiert grundsätzlich zwei Felder, die Sie auch nicht entfernen können: Die Experimentnummer und die „ID“. Bei letzterer handelt es sich um eine eindeutige Identifikationsnummer für das jeweilige Edukt bzw. Produkt. Diese Daten werden benötigt, wenn Sie Ihre CSV-Datei nach einer externen Bearbeitung später wieder in ensochemLab importieren möchten.

Mit einem Klick auf „Weiter“ gelangen Sie zur nächsten Seite des Exportassistenten:



Auf der dieser Seite können Sie auswählen, welche Edukte bzw. Produkte Sie exportieren möchten. Die Daten sind dabei in der Baumstruktur auf der linken Seite nach ihren jeweiligen Experimenten gruppiert. Wenn Sie dort an Stelle eines einzelnen Edukts oder Produkts ein ganzes Experiment auswählen, sehen Sie rechts noch einmal die Experimentnummer und darunter eine Tabelle mit einer Vorschau der Exportdaten. Diese enthält die von Ihnen festgelegten Datenfelder sowie das von ensochemLab benötigte ID-Feld.

Bei der Auswahl eines Edukts oder Produkts sehen Sie eine Vorschau sämtlicher Daten des jeweiligen Elements in einer Ansicht, die dem Experimentassistenten entspricht. Genauso wie dort können Sie zwischen den beiden Seiten „Standarddaten“ und „Weitere Daten“ wechseln. Diese Ansicht hat nur Informationscharakter und soll Ihnen bei der Entscheidung helfen, welche Edukte bzw. Produkte Sie exportieren möchten. Aus diesem Grund sind auch keine Änderungen an einzelnen Datensätzen möglich.



Wenn Sie nur einzelne Edukte bzw. Produkte exportieren möchten, wählen Sie diese bitte in der Liste aus, indem Sie den zugehörigen Haken setzen. Wenn Sie ein Experiment ankreuzen, werden alle seine Edukte bzw. Produkte ausgewählt. Beim Abwählen eines Experiments werden alle untergeordneten Elemente ebenfalls abgewählt.

Um alle Einträge auszuwählen, klicken Sie bitte auf „Alle auswählen“. Mit einem Klick auf „Alle abwählen“ entfernen Sie die Markierungen bei allen Datensätzen.

Daneben stellt ensochemLab einige Funktionen bereit, um nur Datensätze eines bestimmten Typs auszuwählen. Diese sind:

Edukte

Wählt alle normalen Edukte aus

Wählt alle als Reagenz markierten Edukte aus

Wählt alle als Katalysator markierten Edukte aus

Wählt alle als Lösungsmittel markierten Edukte aus

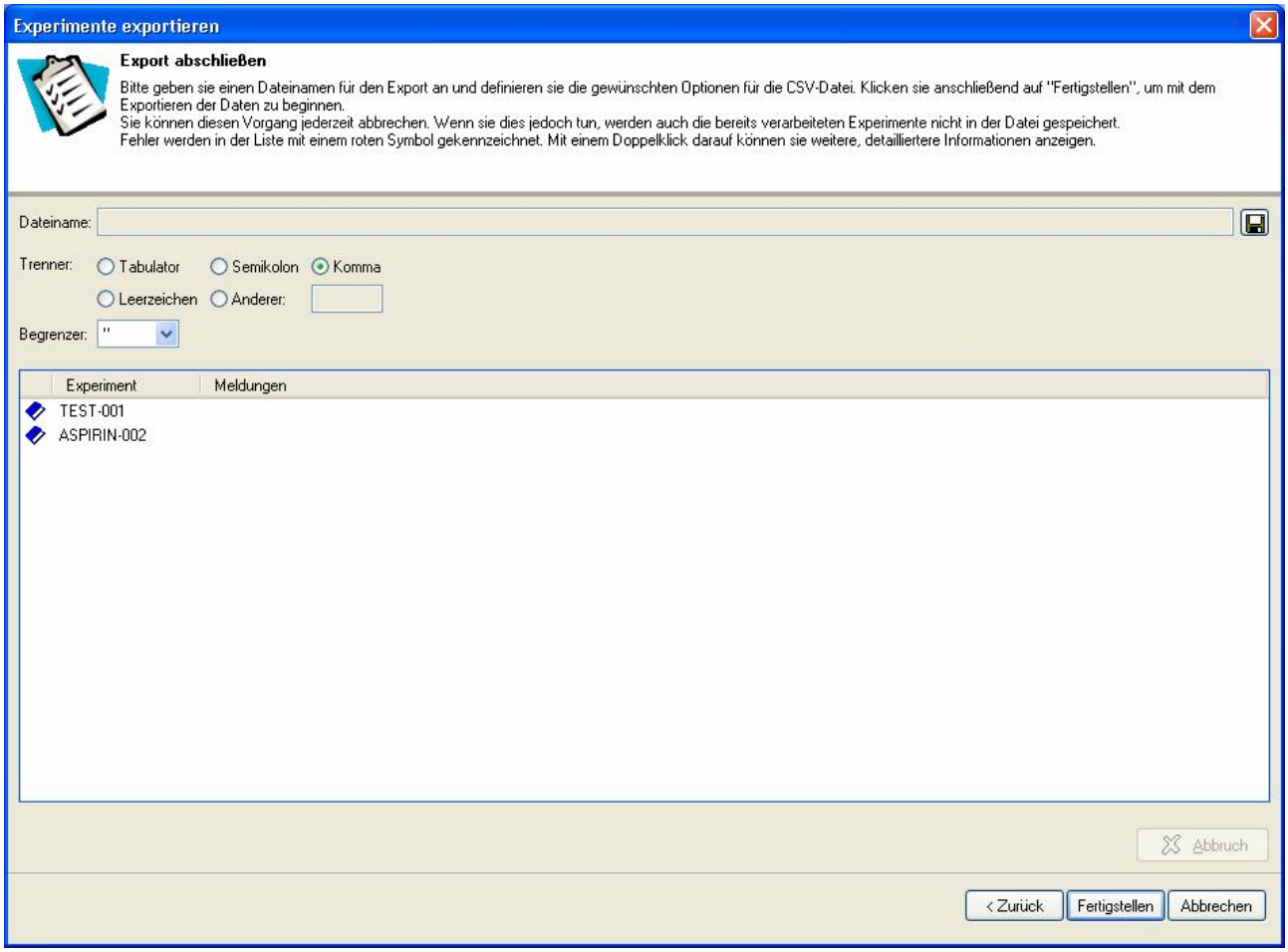
Produkte

Wählt alle Hauptprodukte aus

Wählt alle als Zielmolekül gekennzeichneten Produkte aus

Wählt alle Nebenprodukte aus

Nachdem Sie Ihre Auswahl getroffen haben, klicken Sie bitte auf „Weiter“.


Experimente exportieren
Export abschließen
Bitte geben sie einen Dateinamen für den Export an und definieren sie die gewünschten Optionen für die CSV-Datei. Klicken sie anschließend auf "Fertigstellen", um mit dem Exportieren der Daten zu beginnen.
Sie können diesen Vorgang jederzeit abbrechen. Wenn sie dies jedoch tun, werden auch die bereits verarbeiteten Experimente nicht in der Datei gespeichert.
Fehler werden in der Liste mit einem roten Symbol gekennzeichnet. Mit einem Doppelklick darauf können sie weitere, detailliertere Informationen anzeigen.
Dateiname:
Trenner:
Tabulator
Semikolon
Komma
Leerzeichen
Anderer:
Begrenzer:
Experiment
Meldungen
TEST-001
ASPIRIN-002
Abbruch
< Zurück
Fertigstellen
Abbrechen

Auf der letzten Seite des Exportassistenten können Sie die Datei angeben, in die Ihre Daten exportiert werden sollen. Klicken Sie dazu auf den Knopf „Dateinamen wählen“. Es erscheint ein normaler „Speichern unter“ Dialog, wie Sie ihn aus vielen Anwendungen bereits kennen.

Zudem können Sie einige Optionen für Ihre CSV-Datei festlegen. Diese wurden bereits im Kapitel über den Export von tabellarischen Daten eingehend beleuchtet.

Klicken Sie anschließend auf „Fertigstellen“, um mit der Erstellung der Datei zu beginnen. Sie können diesen Vorgang jederzeit mit einem Klick auf den Knopf „Abbruch“ unterhalb der Liste beenden. Dabei wird jedoch der Gesamtvorgang abgebrochen, d.h. Sie erhalten keine Exportdatei, auch nicht mit den Daten der bereits verarbeiteten Experimente.

Die Liste zeigt während des Exports den aktuellen Status an. Bei Experimenten, deren Export fehlgeschlagen ist, finden Sie in der Spalte „Meldungen“ jeweils die zugehörige Begründung bzw. Fehlermeldung.

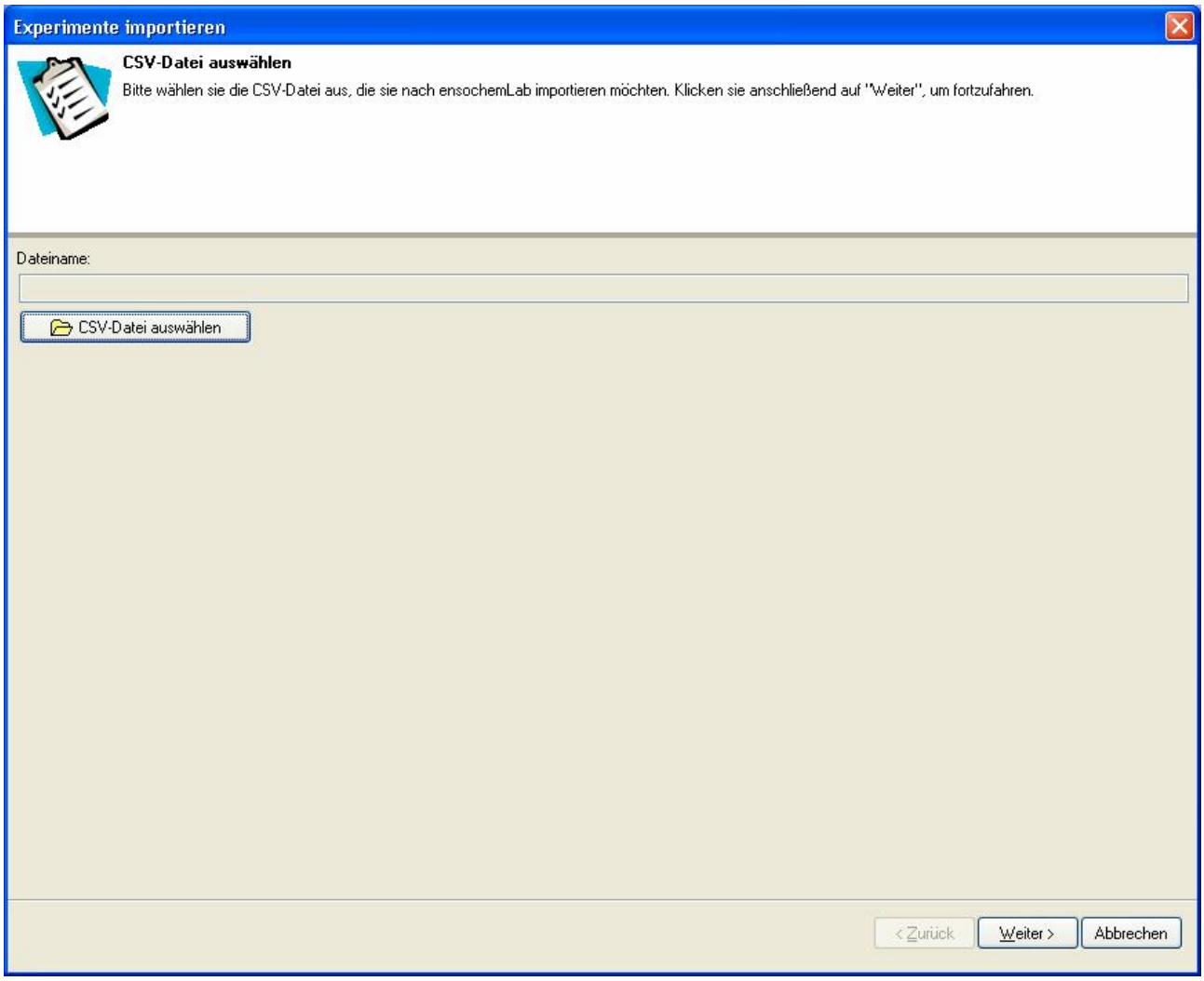
Nachdem der Vorgang abgeschlossen wurde und Sie die Ergebnistabelle überprüft haben, klicken Sie bitte auf „Schließen“ um zum ensochemLab Hauptfenster zurückzukehren.

16.4. Import von Experimentdaten aus CSV

Der Import von Experimentdaten aus einer CSV-Datei dient primär dazu, ursprünglich aus ensochemLab exportierte und dann mit einer externen Anwendung bearbeitete Daten zurück zu übertragen. Bitte beachten Sie, dass während der externen Bearbeitung die Spalten „Experimentnummer“ und „ID“ nicht verloren gehen dürfen. Es gibt keine Unterstützung für eine Wiederherstellung dieser Daten oder eine manuelle Zuordnung zu den jeweiligen Datensätzen.
Bei vollständig extern erstellten Daten müssen diese beiden Spalten mit gültigen Werten gefüllt werden.

Diese Funktion ist nicht dazu geeignet, neue Experimente zu erstellen. Es können nur Daten in bestehende Experimente und deren Edukte bzw. Produkte übernommen werden. Die importierten Daten überschreiben dabei immer die bereits in der Datenbank vorhandenen. Stellen Sie daher bitte in jedem Fall sicher, die korrekten Daten zu importieren. Die Wiederherstellung der vorherigen Daten ist nur über die optional erhältliche Versionsverwaltung möglich.

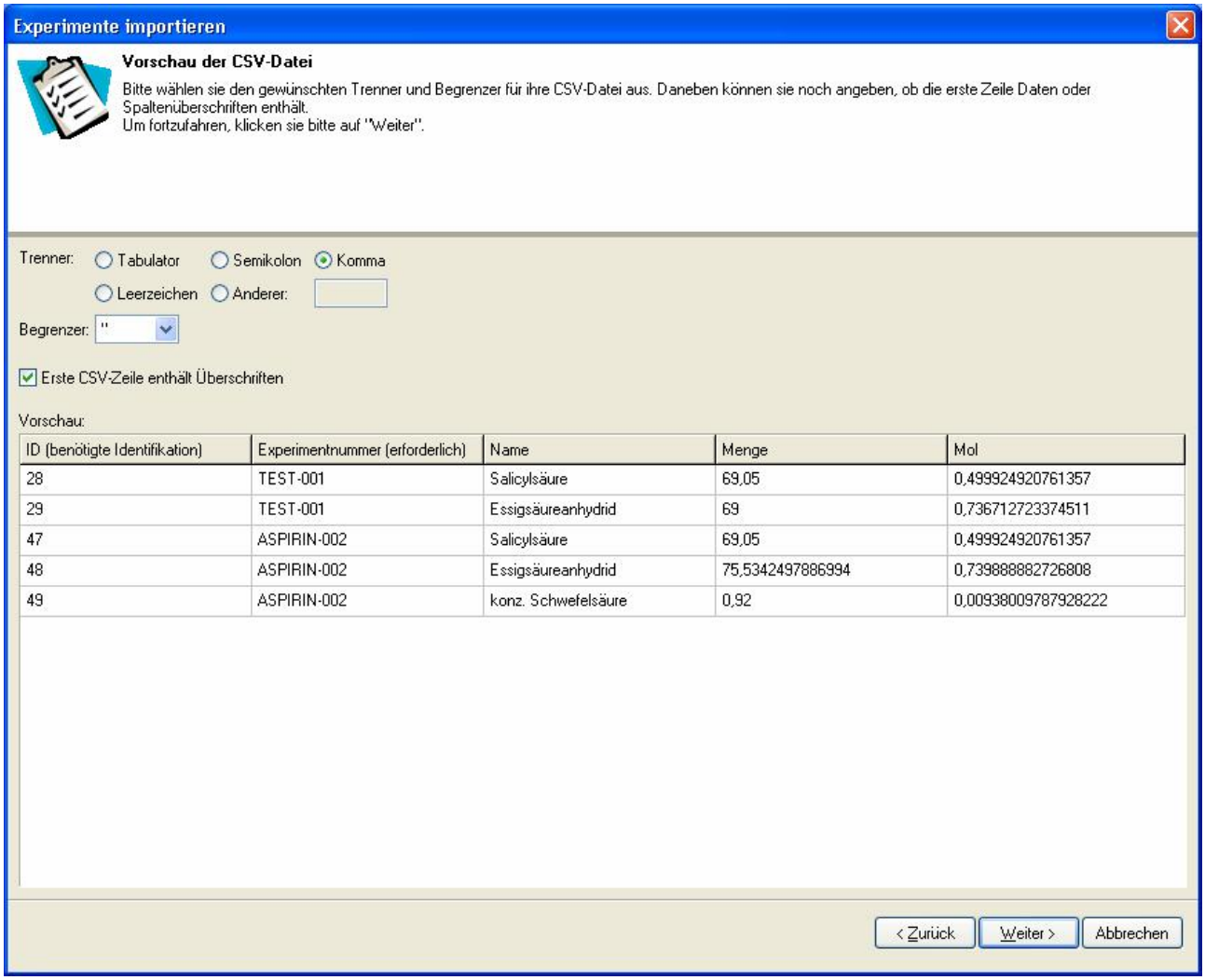
Um den Importassistenten zu starten, klicken Sie bitte im Hauptmenü unter „Liste“ auf „Experimente importieren“. Die aktuelle Auswahl im Navigator spielt dabei keine Rolle. Der folgende Dialog erscheint:


Experimente importieren
CSV-Datei auswählen
Bitte wählen sie die CSV-Datei aus, die sie nach ensochemLab importieren möchten. Klicken sie anschließend auf "Weiter", um fortzufahren.
Dateiname:
CSV-Datei auswählen
< Zurück
Weiter >
Abbrechen

Im ersten Schritt müssen Sie die zu importierende CSV-Datei auswählen. Klicken Sie hierzu auf den Knopf „CSV-Datei auswählen“. Es wird ein normaler „Datei öffnen“ Dialog angezeigt, den Sie bereits aus vielen anderen Anwendungen kennen. Wenn Sie möchten, können Sie die Datei auch stattdessen aus dem Windows Explorer heraus auf das Fenster ziehen.

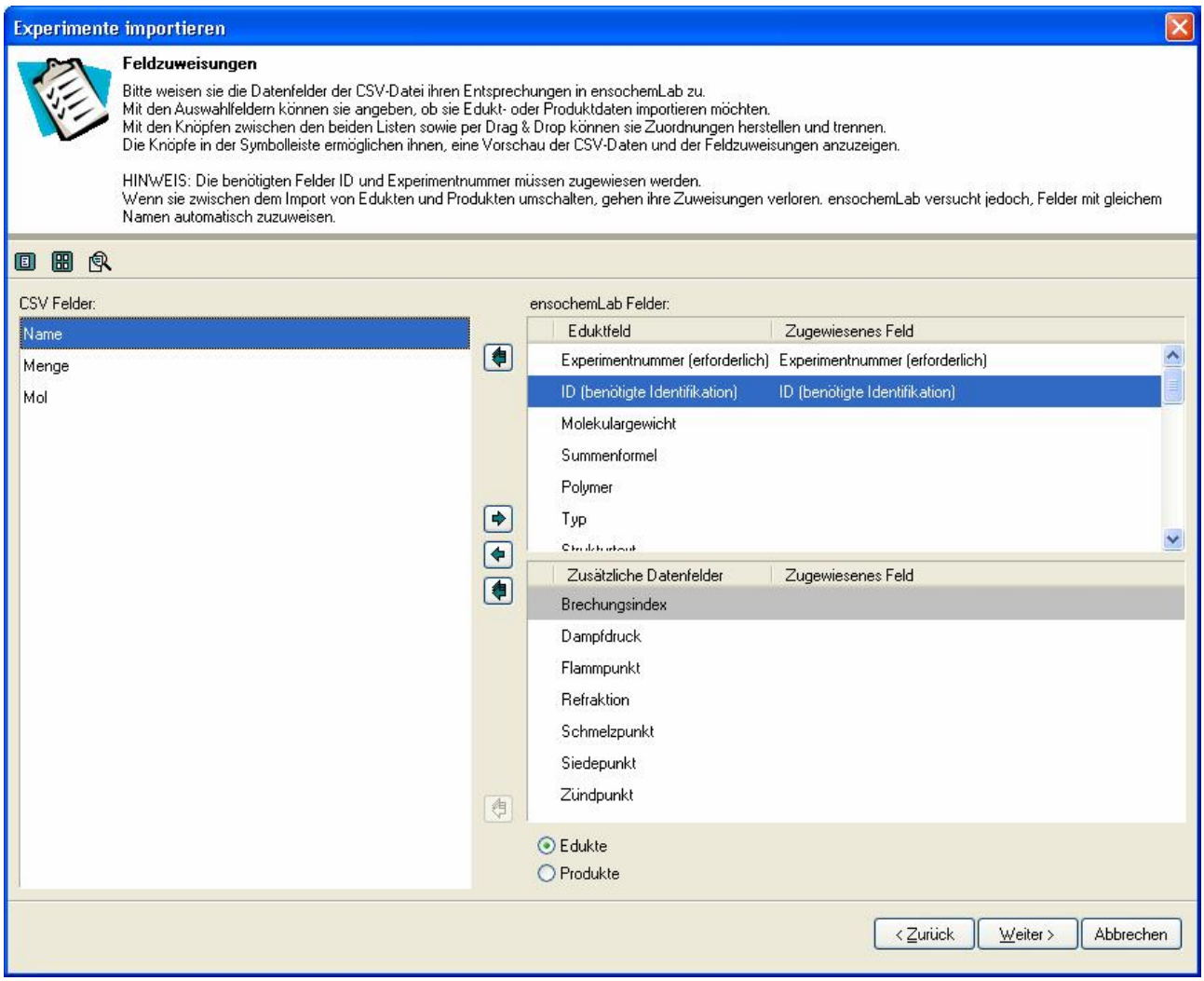
Nachdem Sie Ihre CSV-Datei ausgewählt haben (diese wird dann mitsamt Pfad im Feld „Dateiname“ angezeigt), klicken Sie bitte auf „Weiter“, um zur nächsten Seite des Importassistenten zu gelangen.

Auf der nun folgenden Seite können Sie die Optionen Ihrer CSV-Datei einstellen. Genau wie bereits in einem früheren Kapitel über den Import von tabellarischen Daten gezeigt, erhalten Sie eine Vorschau, mit der Sie die Auswirkungen der einzelnen Optionen auf die Erkennung und Verarbeitung des Dateiinhalts kontrollieren können.
Wenn Sie die Datei über ensochemLab exportiert haben, sollten Sie hier wieder die exakt gleichen Optionen verwenden, die Sie auch beim Export verwendet haben. Allgemeine Hinweise zum Erkennen der geeigneten Optionen bei anderen Datenquellen bzw. Dateien unbekannter Herkunft finden Sie im genannten Kapitel weiter vorne in diesem Handbuch.


Experimente importieren
Vorschau der CSV-Datei
Bitte wählen sie den gewünschten Trenner und Begrenzer für ihre CSV-Datei aus. Daneben können sie noch angeben, ob die erste Zeile Daten oder Spaltenüberschriften enthält.
Um fortzufahren, klicken sie bitte auf "Weiter".
Trenner: Tabulator Semikolon Komma
Leerzeichen Anderer:
Begrenzer: "
Erste CSV-Zeile enthält Überschriften
Vorschau:
ID (benötigte Identifikation) | Experimentnummer (erforderlich) | Name | Menge | Mol
28 | TEST-001 | Salicylsäure | 69,05 | 0,499924920761357
29 | TEST-001 | Essigsäureanhydrid | 69 | 0,736712723374511
47 | ASPIRIN-002 | Salicylsäure | 69,05 | 0,499924920761357
48 | ASPIRIN-002 | Essigsäureanhydrid | 75,5342497886994 | 0,739888882726808
49 | ASPIRIN-002 | konz. Schwefelsäure | 0,92 | 0,00938009787928222
< Zurück
Weiter >
Abbrechen

Sie können Ihre Importoptionen dadurch kontrollieren, dass die „ID“ eine gültige ganze, positive Zahl sein muss. Sie darf bei keinem Datensatz leer sein. Ist dies nicht der Fall, müssen Sie die Optionen noch einmal ändern.

Sind Sie mit der Vorschau zufrieden, klicken Sie bitte auf „Weiter“, um fortzufahren.



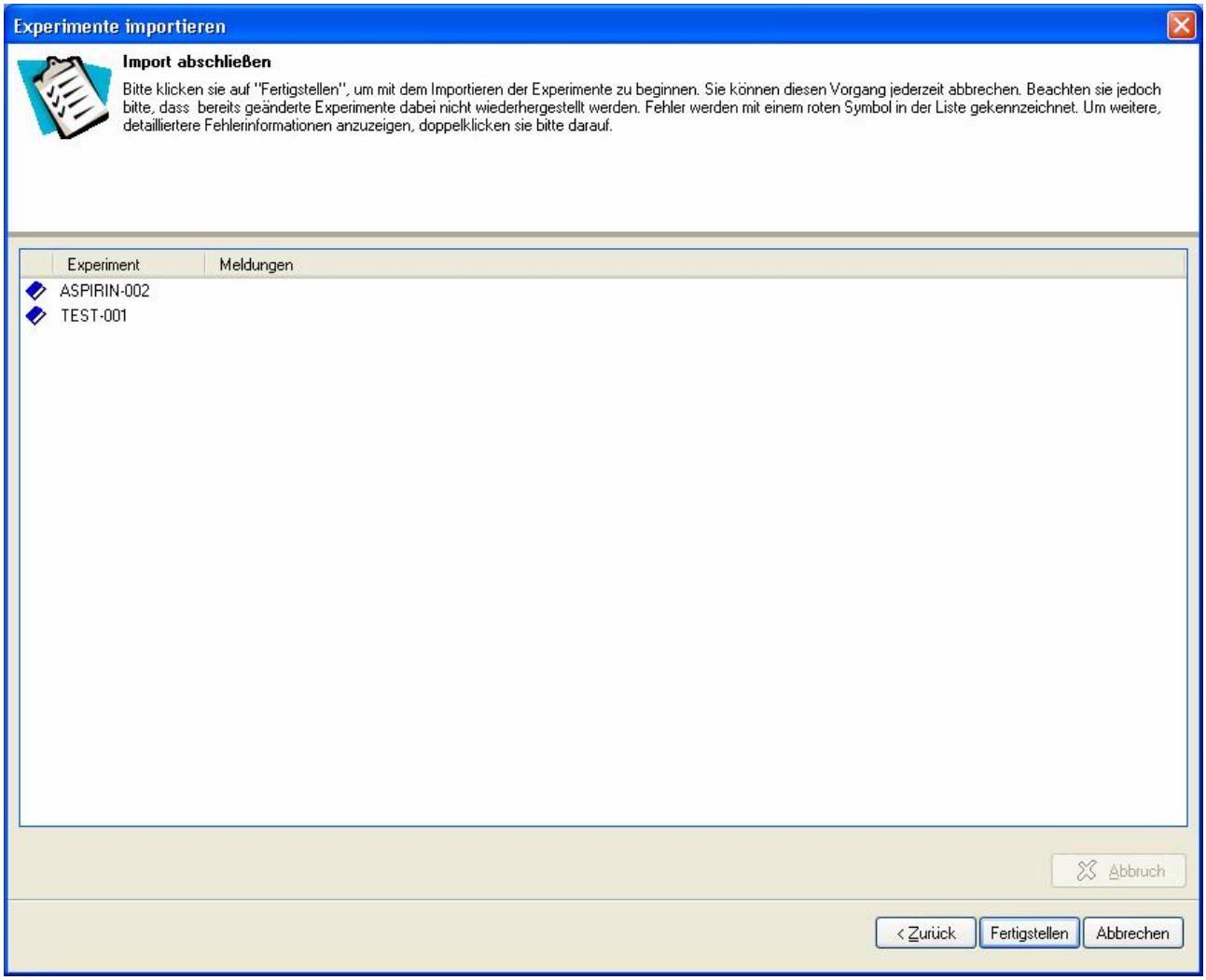
Auf dieser Seite können Sie die Felder Ihrer CSV-Datei den entsprechenden Feldern in ensochemLab zuweisen. Bitte beachten Sie jedoch, dass Sie zuerst angeben müssen, ob Sie Edukt- oder Produktdaten importieren möchten. Wenn Sie diese Auswahl nachträglich ändern, werden alle Ihre bereits vorgenommenen Zuweisungen verworfen.

Im Prinzip funktioniert diese Zuweisung wie bereits im Kapitel über den Import tabellarischer Daten beschrieben. Der einzige Unterschied besteht darin, dass es hier neben den normalen Datenfeldern noch die vom Administrator definierten zusätzlichen Datenfelder gibt. Diesen können Sie jedoch auch nach dem bekannten Prinzip Importfelder zuweisen.
Im Vergleich zum bereits bekannten Zuweisungsdialog finden Sie hier mehrere Knöpfe zum Entfernen der Zuweisungen: Der Schalter ganz oben (neben der Liste der Standardfelder) entfernt alle Standardfelder, der Schalter ganz unten (neben der Liste der zusätzlichen Datenfelder) alle zusätzlichen Felder. Mit dem „Entfernen“ Schalter in der Mitte können Sie alle Zuweisungen unabhängig von ihrem Typ löschen.

ensochemLab versucht auch in diesem Modul, die vom Namen her bekannten Felder automatisch zuzuweisen. Manuelle Zuweisungen sind nur dann nötig, wenn Feldnamen nicht den in ensochemLab verwendeten Bezeichnern entsprechen.

Die Felder „Experimentnummer“ und „ID“ müssen immer zugewiesen werden, da sie für die Identifikation der einzelnen Datensätze benötigt werden. Zusätzlich müssen Sie noch mindestens ein Feld mit „wirklichen“, d.h. Benutzerdaten zuweisen.

Nachdem Sie alle benötigten Felder zugewiesen haben, klicken Sie bitte auf „Weiter“, um fortzufahren.


Experimente importieren
Import abschließen
Bitte klicken sie auf "Fertigstellen", um mit dem Importieren der Experimente zu beginnen. Sie können diesen Vorgang jederzeit abbrechen. Beachten sie jedoch bitte, dass bereits geänderte Experimente dabei nicht wiederhergestellt werden. Fehler werden mit einem roten Symbol in der Liste gekennzeichnet. Um weitere, detailliertere Fehlerinformationen anzuzeigen, doppelklicken sie bitte darauf.
Experiment
Meldungen
ASPIRIN-002
TEST-001
Abbruch
< Zurück
Fertigstellen
Abbrechen

Dies ist die letzte Seite des Importassistenten. Hier sehen Sie alle Experimente, zu denen Daten importiert werden sollen. Das Bild in der ersten Spalte gibt den jeweiligen Status (noch nicht begonnen, Import läuft, abgeschlossen, Fehler) an. Schlägt der Import eines Datensatzes zu einem Experiment fehl, sehen Sie die entsprechende(n) Fehlermeldung(en) anschließend in der dritten Spalte.

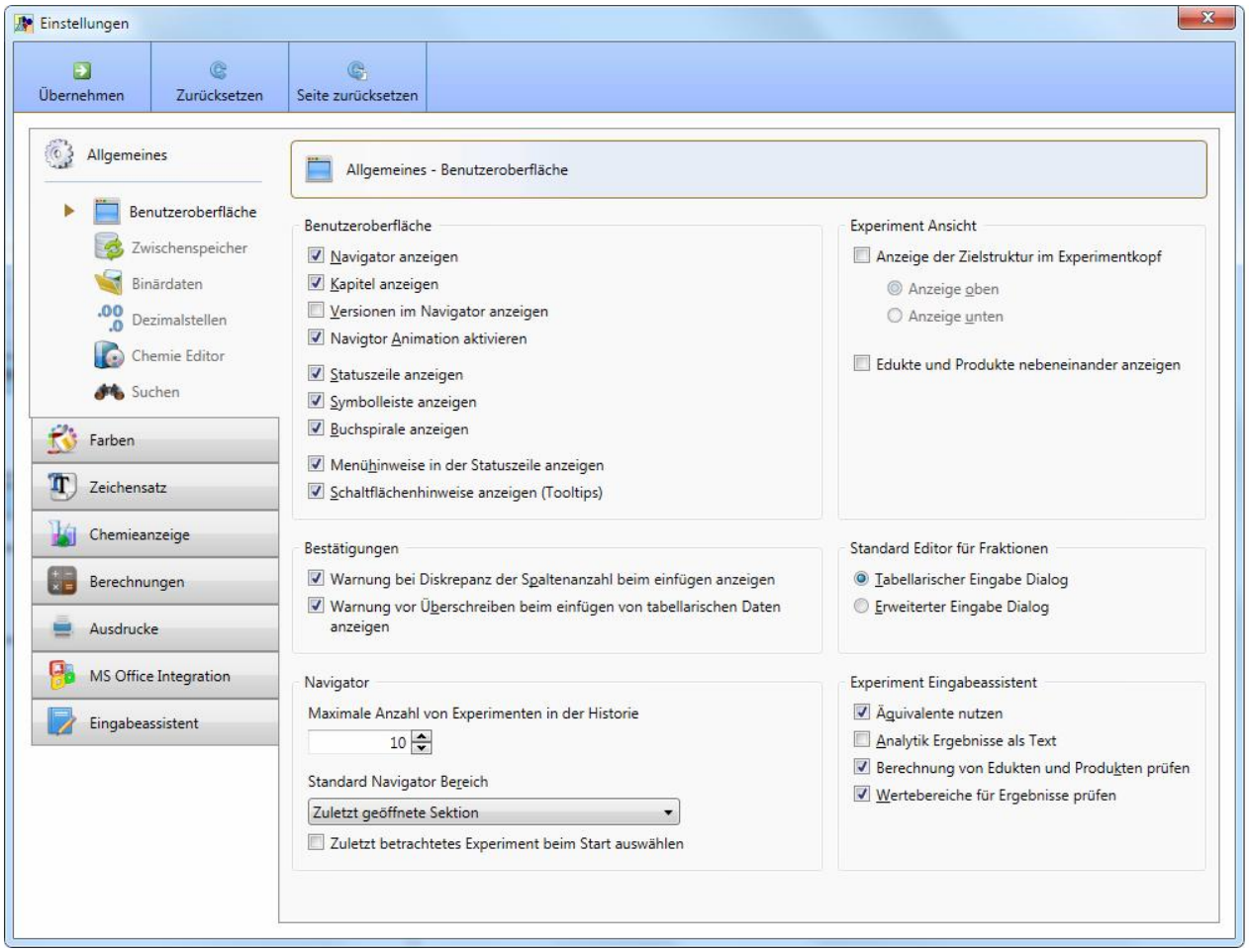
Um den Importvorgang zu starten, klicken Sie bitte auf „Fertigstellen“. ensochemLab arbeitet nun alle Experimente in der Liste nach der Reihe ab. Sie können den Import jederzeit mit einem Klick auf die Schaltfläche „Abbruch“ stoppen. Bitte beachten Sie jedoch, dass die bereits verarbeiteten Experimente dabei nicht wiederhergestellt werden.

Nachdem der Vorgang abgeschlossen wurde und Sie die Ergebnisliste überprüft haben, klicken Sie bitte auf „Schließen“, um zum ensochemLab Hauptfenster zurückzukehren.

Zusammenfassung:	ensochemLab ermöglicht Ihnen, den Inhalt von CSV Dateien in tabellarische Datenmengen zu importieren. Hierbei unterstützt Sie ein komfortabler Assistent. Über die verschiedenen Vorschaumöglichkeiten können Sie die Auswirkungen der nötigen Optionen anzeigen lassen. Zusätzlich können auch Edukt- bzw. Produktdaten über das CSV-Format mit anderen Programmen ausgetauscht werden.

17. Anpassen Ihrer Einstellungen

Vielleicht haben Sie ensochemLab bisher in den Standardeinstellungen verwendet. Die dort verwendeten Voreinstellungen sind für die meisten Benutzer und Anwendungsbereiche passend. Sie können jedoch Änderungen vornehmen, um die Software an Ihre Vorstellungen anzupassen. Gehen Sie dazu im Hauptmenü unter „Optionen“ auf „Einstellungen“.



Die gewünschte Rubrik können Sie über die Tab-Leiste am linken Rand auswählen. Einzelne Rubriken sind noch weiter unterteilt.

Dieses Handbuch bietet Ihnen eine Referenz zu allen Optionen der einzelnen Seiten.

Wenn Sie eine Option ausprobieren möchten, tun Sie es einfach! Mit dem Knopf „Seite zurücksetzen“ können Sie jederzeit wieder zu den Standardeinstellungen dieser Seite zurückkehren. Um alle Seiten zurückzusetzen, verwenden Sie bitte den Knopf „Zurücksetzen“.

Mit dem Knopf „Übernehmen“ können Sie Ihre neuen Einstellungen abspeichern, ohne das Fenster zu schließen. Dies kann zum Beispiel beim Ändern von Anzeigeeinstellungen sinnvoll sein, wenn Sie das Ergebnis direkt ansehen möchten.

Sie können das Fenster der Einstellung geöffnet lassen und trotzdem mit ensochemLab weiter arbeiten. Wechseln Sie einfach mit Alt-Tab oder über die Taskleiste von Windows hin und her.

17.1. Allgemeines

17.1.1. Benutzeroberfläche

Benutzeroberfläche:

Navigator anzeigen	Legt fest, ob im Hauptfenster von ensochemLab die Navigationsleiste angezeigt werden soll
Kapitel anzeigen	Legt fest, ob die Kapitelauswahl unter dem Navigator angezeigt werden soll. Ist der Navigator unsichtbar, werden auch die Kapitel automatisch ausgeblendet.
Versionen im Navigator anzeigen	Legt fest, ob die einzelnen Versionen eines Experiments als Unterknoten unter dem zugehörigen Experimenteintrag im Navigator angezeigt werden sollen.
Navigator Animation aktivieren	Legt fest, ob die Kapitel im Navigator bei einem Kapitelwechsel gleitend an die neue Position geschoben werden sollen.
Statuszeile anzeigen	Legt fest, ob die Statuszeile im Hauptfenster eingeblendet werden soll
Symbolleiste anzeigen	Legt fest, ob die Symbolleiste im Hauptfenster eingeblendet werden soll.
Buchspirale anzeigen	Legt fest, ob in der Standardansicht der Experimentanzeige ein Spiralblock zwischen Navigator und Daten angezeigt werden soll.
Menühinweise in der Statusleiste anzeigen	Legt fest, ob in der Statusleiste zusätzliche Informationen zum aktuellen Menüpunkt angezeigt werden sollen.
Schaltflächenhinweise anzeigen (Tooltips)	Legt fest, ob für alle Knöpfe in Symbolleisten Hinweisfenster mit kurzen Erklärungen angezeigt werden sollen.

Experiment Ansicht:

Anzeige der Zielstruktur im Experimentkopf	Legt fest, ob der Name des Zielmoleküls in den Kopfdaten eines Experiments angezeigt werden soll. Sie können auswählen, ob diese Anzeige ober- oder unterhalb der restlichen Kopfdaten geschehen soll.
Edukte und Produkte nebeneinander anzeigen	Ist diese Option gewählt, werden die Tabellen der Edukte und Produkte nebeneinander anzeigt, ansonsten untereinander.

Bestätigungen:

Warnung bei Diskrepanz der Spaltenanzahl beim einfügen anzeigen	Legt fest, ob beim Einfügen einer Tabelle z.B. im Versuchsverlauf eine Warnung angezeigt werden soll, wenn die eingefügte Tabelle eine andere Spaltenzahl als die in ensochemLab definierte Tabelle besitzt.
Warnung vor Überschreiben beim einfügen von tabellarischen Daten anzeigen	Legt fest, ob eine Warnung angezeigt werden soll, wenn Sie bestehende Tabellendaten mit dem Inhalt der Zwischenablage überschreiben.

Standard Editor für Fraktionen:

Hier können Sie festlegen, welcher Fraktionsdialog geöffnet werden soll, wenn Sie auf den Eintrag „Fraktionen bearbeiten“ in der Symbolleiste des Hauptfensters klicken, ohne explizit einen bestimmten Editor aus dem Drop Down Menü auszuwählen.

Navigator:

Maximale Anzahl von Experimenten in der Historie	Legt fest, wie viele Experimente im Ordner „Historie“ gespeichert werden können, bevor der älteste Eintrag wieder automatisch überschrieben wird.
Standard Navigator Bereich	Legt den Navigatorbereich fest, der nach der Anmeldung automatisch aufgeklappt sein soll.
Zuletzt betrachtetes Experiment beim Start auswählen	Legt fest, ob das zuletzt im Navigator ausgewählte Experiment beim nächsten Start von ensochemLab automatisch selektiert und die zugehörigen Daten angezeigt werden sollen

Experiment Eingabeassistent:

Äquivalente nutzen	Legt fest, ob im Eingabeassistenten standardmäßig mit Äquivalenten gerechnet werden soll.
Analytik Ergebnisse als Text	Gibt an, wie Analytikdatensätze zu einem Experiment bevorzugt eingegeben werden (Text wenn selektiert, sonst numerisch).
Berechnungen von Edukten und Produkten prüfen	Legt fest, ob ensochemLab die für die Edukte und Produkte eines Experiments angegebenen Werte überprüfen soll. Hierbei wird das Ergebnis der automatischen Berechnungsfunktionen als Ausgangspunkt zugrunde gelegt. Sind nicht alle Werte mit dem Ergebnis vereinbar, so wird eine Warnung ausgegeben. Die Überprüfung findet bei jedem Speichern eines Experiments statt, unabhängig davon, ob es sich um ein neues oder um ein verändertes Experiment handelt. Ein zusätzlicher Vergleich wird beim Verlassen der Eingabeseiten für Edukte und Produkte durchgeführt.
Wertebereiche für Ergebnisse prüfen	Legt fest, ob die Größenordnung der (automatischen) Berechnungsergebnisse anhand fester Kriterien geprüft werden soll. Bei zu großen errechneten Werten werden dabei Warnungen angezeigt.

17.1.2. Zwischenspeicher

Automatische Verwaltung	Mit dieser Option bestimmt ensochemLab die Parameter des Zwischenspeichers selbst. Dies ist die empfohlene Konfiguration.
Anzahl von Experimenten limitieren	Mit dieser Option legen Sie die maximale Anzahl der Experimente im Zwischenspeicher fest. Ist diese erreicht und es wird ein neues Experiment geladen, wird der älteste Eintrag wieder aus dem Zwischenspeicher entfernt.
Belegten Speicher limitieren	Mit dieser Option legen Sie die maximale Anzahl Größe des Zwischenspeichers in MB fest. Ist diese erreicht und es wird ein neues Experiment geladen, wird der älteste Eintrag wieder aus dem Zwischenspeicher entfernt.

17.1.3. Binärdaten

Ansicht:

Miniaturbild	Zeigt nur ein Vorschaubild in der eingestellten Größe an.
Miniaturbild und Namen	Zeigt das Vorschaubild und den zugehörigen Dateinamen darunter an.
Piktogramm und Namen	Zeigt ein Symbol zur Veranschaulichung des Dateityps sowie den zugehörigen Dateinamen an.

Bitte beachten Sie, dass die Anzeige von Vorschaubildern nur für bestimmte von ensochemLab unterstützte Dateiformate möglich ist.

Zusätzlich können Sie die Größe der Miniaturbilder in der Experimentanzeige des Hauptfensters festlegen. Die Größe wird hierbei in Pixeln angegeben. Möglich sind alle natürlichen Zahlen im Intervall 16 bis 128. Für die Anzeige als „Piktogramm und Namen“ können Sie die Anzahl von Spalten angeben wenn Sie mehrere Symbole nebeneinander anzeigen möchten.

Für die Dateinamen können Sie angeben, ob die Namen in eine neue Zeile umgebrochen werden dürfen. Andernfalls werden zu lange Dateinamen mit drei Punkten am Ende abgekürzt. (Beispiel: „Ein langer Dat…“)

Ladevorgang:

Binärdateien können entweder immer automatisch, grundsätzlich nur manuell oder ab einer bestimmten Größe manuell herunter geladen werden. Dies hängt normalerweise von Ihrer Anbindung an den ensochemLab Server ab. Verfügen Sie nur über eine langsame Anbindung, sollten Sie Binärdateien ab einer gewissen Größe nur noch im Bedarfsfall herunter laden. Wählen Sie dazu bitte die entsprechende Option aus und geben Sie dann die gewünschte Maximalgröße ein.

Binärdateien niemals herunterladen	Sämtliche Binärdateien müssen manuell nachgeladen werden
Binärdateien immer herunterladen	Alle Binärdateien werden unabhängig von ihrer Größe immer herunter geladen
Binärdateien herunterladen bis zu einer Größe von	Binärdateien werden nur bis zu eingestellten Größe herunter geladen. Größere Anhänge müssen manuell nachgeladen werden.

Standard Aktivität:

Hiermit legen Sie fest, welche Operation standardmäßig ausgeführt werden soll, wenn Sie auf einem Binärdatensatz in der Experimentanzeige doppelklicken.

17.1.4. Dezimalstellen

Hier können Sie auswählen, wie viele Dezimalstellen von ensochemLab angezeigt werden sollen. Hierbei können Sie nach Bereich unterteilt einen Wert im Bereich von 0 bis 8 angeben.

17.1.5. Chemie Editor

Auf dieser Seite können Sie wählen, welchen Chemie-Editor Sie zur Eingabe chemischer Strukturen und Reaktionen verwenden möchten.

Bitte beachten Sie, dass nur der integrierte ensochemEditor und der ensochemEditor Web Edition im Lieferumfang von ensochemLab enthalten ist. Alle anderen Editoren müssen gesondert bezogen, lizenziert und installiert werden. Nähere Informationen dazu entnehmen Sie bitte der dem Editor beiliegenden Dokumentation.

Falls Sie einen Editor auswählen, der nicht auf allen von Ihnen verwendeten Computern verfügbar ist, so wird im Fehlerfall eine entsprechende Hinweismeldung beim Login angezeigt und automatisch auf den integrierten ensochemEditor als Standardeditor umgeschaltet.

17.1.6. Suchen

Auf dieser Seite können Sie die Standardsuchfunktion festlegen. Eine Standardsuche wird immer dann gestartet, wenn Sie in der Symbolleiste des Hauptfensters auf den Suchknopf klicken, ohne einen speziellen Suchtyp über das Drop Down Menü anzugeben.

Darüber hinaus können Sie festlegen ob die Standard Sortierreihenfolge für Suchergebnisse auf- oder absteigend sein soll.

17.2 Farben

Auf dieser Seite können Sie die Farben wählen, die ensochemLab bei der Anzeige und beim Ausdruck von Experimenten verwenden soll.

17.2.1. Experimente

Auf dieser Seite definieren Sie die Farben für Anzeige und Ausdruck von Experimenten.

17.2.2. Benutzeroberfläche

Auf dieser Seite definieren Sie die Farben für die Benutzeroberfläche von ensochemLab.

17.3. Zeichensatz

Schriftarten:

Um eine Schriftart zu ändern, klicken Sie bitte auf den Knopf neben dem Beispielfeld. Wählen Sie dann im erscheinenden Dialog Ihre gewünschte Schrift aus. Der Beispieltext verwendet auch die in den Farbeinstellungen festgelegten Farben für die jeweiligen Bereiche und dient daher auch als Vorschau.

Hyperlinks:

Mit dieser Option können sie die Darstellung von "Link Feldern" in ensochemLab bestimmen. Die Einstellungen betreffen Verweise zur Analytik, Literatur und die vom Administrator definierten weiteren Daten des Typs Link.

17.4. Chemieanzeige

17.4.1. Allgemeines

Auf dieser Seite können Sie festlegen, wie Reaktionen und Moleküle in ensochemLab angezeigt werden sollen. Diese Einstellungen gelten für alle Programmmodule (Eingabeassistent, Anzeige, Druckvorschau usw.) gleichermaßen.

Anzeige der Molekülposition	Wenn das Feld markiert ist, wird unter den einzelnen Edukten und Produkten in der Anzeige eine fortlaufende Benennung (A, B, C, usw.) eingeblendet.
Anzeige von Summenformel und Molarer Masse	Dieses Feld bezieht sich einerseits auf einzelne Moleküle, andererseits aber auch auf ganze Reaktionen, bei denen die Daten zu jedem Einzelmolekül unter der jeweiligen Struktur angezeigt werden
Anzeige der Wasserstoffe	Hier können Sie auswählen, wie implizite Wasserstoffatome angezeigt werden sollen. • Keine Anzeige • An Heteroatomen • An endständigen Atomen • An Hetero und endständigen Atomen • An allen Atomen
Anzeige der Reaktionszentren	Hier können Sie die Art der Anzeige von Reaktionszentren einstellen. • Keine Anzeige Die Reaktionszentren werden nicht angezeigt. • Hash Die Reaktionszentren werden als gestrichelte Linien angezeigt. • Farbe Die Reaktionszentren werden in Farbe angezeigt.
Anzeige der Atom Mappings	Hier können Sie festlegen, ob Atom-Mapping in der Anzeige sichtbar sein soll.
Anzeige der Reaktionsbeschriftungen	Die Einstellung bestimmt, ob die in den Experimentdaten gespeicherten Texte auf bzw. unter dem Reaktionspfeil in der Experimentanzeige berücksichtigt werden sollen.
Anzeige der Molekülbeschriftungen	Die Einstellung bestimmt, ob die im Experimentassistenten zu Edukten und Produkten eingegebenen Texte bzw. Beschreibungen sichtbar sein sollen.
Anzeige der Reagenzien	Die Einstellung gibt an ob Reagenzien angezeigt oder ausgeblendet werden sollen.
Anzeige der Lösungsmittel	Die Einstellung gibt an ob Lösungsmittel angezeigt oder ausgeblendet werden sollen.
Anzeige der Katalysatoren	Die Einstellung gibt an ob Katalysatoren angezeigt oder ausgeblendet werden sollen.
Anzeige der Nebenprodukte	Die Einstellung gibt an ob Nebenprodukte angezeigt oder ausgeblendet werden sollen.

17.4.2. Hervorhebungen

Edukte und Produkte:

Mit dieser Option können Sie verschiedene Typen von Edukten und Produkten auf den ersten Blick kenntlich machen. Ist eine andere Option als „Keine [Hervorhebung]“ gewählt, können Sie für jeden Typ eine andere Farbe auswählen. ensochemLab bietet die folgenden Hervorhebungsmodi an.

Keine	Edukte und Produkte werden nicht gesondert hervorgehoben.
Farbige Struktur	Die Struktur wird mit der eingestellten Farbe gezeichnet.
Farbiger Rahmen	Es wird ein farbiges Rechteck um die betreffende Struktur gezeichnet.
Farbiger Hintergrund	Der Hintergrund der entsprechenden Struktur wird in einem Rechteck eingefärbt.

Zielstrukturen:

Getrennt von den Edukten und den „normalen“ Produkten können Sie für Zielmoleküle noch einmal die gleichen Hervorhebungen konfigurieren. Dies ermöglicht Ihnen z.B. Reagenzien und Katalysatoren nur zum umrahmen, Zielmoleküle aber farblich zu hinterlegen.

Mit der Option „Einstellungen für Hervorhebungen auch beim Drucken anwenden“, legen Sie fest, ob die eingestellten Markierungen mit dem Experiment ausgedruckt werden sollen oder nicht.

17.5. Berechnungen

Auf dieser Seite können Sie verschiedene Einstellungen für die automatischen und manuellen Berechnungsfunktionen bei den Edukten und Produkten festlegen.

Automatische Berechnung der Edukte und Produkte	Hier legen Sie fest, ob Berechnungen wann immer möglich automatisch ausgeführt werden sollen. Auch wenn Sie diese Funktion nicht aktivieren, können Sie mit Hilfe der entsprechenden Knöpfe im Experimentassistenten immer noch manuelle Berechnungen durchführen.
Automatische Berechnung des Wertes nach Änderung der Einheit	Wenn das Feld markiert ist, wird bei Änderung einer Einheit der zugehörige Wert so angepasst, dass der effektive Wert unverändert ist.
Warnungen behandeln wie Fehler	Diese Option steuert das Verhalten beim Schließen des Assistenten. Wenn Berechnungsfehler auftreten, werden diese angezeigt, bevor das Experiment gespeichert wird. Warnungen werden standardmäßig nicht angezeigt. Wenn diese Option ausgewählt ist, wird auch bei Warnungen ein Dialog angezeigt.
Wert und Einheit automatisch an den Bereich 0,001 bis 999 anpassen	Mit dieser Option werden Werte automatisch an einen Bereich zwischen 0,001 und 999 angepasst. Fällt ein Wert aus diesem Bereich heraus, wird er automatisch in die nächste passende größere Einheit umgerechnet

Der Rest der Seite legt fest, wie Berechnungen vorzunehmen sind. Sie können angeben, welche Werte angepasst werden sollen, wenn Sie bestimmte Datenwerte verändern. Um einen Eintrag zu ändern, klicken Sie bitte einfach auf den entsprechenden Link. Daraufhin werden darunter die verfügbaren Optionen eingeblendet, die Sie dann direkt auf der Seite verändern können.

Am unteren Rand finden Sie links einen Link mit dem Sie die aktuellen Einstellungen auf die Standardwerte zurücksetzen können. Daneben gibt es einen Link der das Fenster zur Verwaltung der Berechnungsvorlagen öffnet.

Mit dem Link am rechten Rand können Sie eine existierende Berechnungsvorlage auswählen. Wenn es sich dabei um eine Ihrer privaten Vorlagen handelt, können Sie diese auch direkt im Fenster bearbeiten.

Mit den genauen Bedeutungen sämtlicher Berechnungsoptionen befasst sich ein gesondertes Kapitel: „Automatische Berechnungen“.

17.6. Ausdrucke

Die Einstellungen auf dieser Seite hängen von den technische Daten Ihres Druckers und dem verwendeten Papier ab.

Seitenränder (mm):

In diesem Bereich können Sie Seitenränder einstellen, die beim Drucken an den jeweiligen Rändern frei gelassen werden sollen.

Ausdruckgestaltung:

Für den Fall, dass die Verwendung eines speziellen Drucklayouts gewünscht ist, können sie hier eine entsprechende Vorauswahl treffen:

Layout	Liste aller verfügbaren Layouts. Das hier eingestellte wird beim Ausdruck im „Seite Einrichten" Dialog automatisch gewählt.
Aktuelles Layout benutzen	Mit dieser Auswahl erfolgt beim regulären Ausdruck keine Anzeige des „Seite Einrichten" Dialoges.

Fußzeilen Bereich:

Hier können Sie einstellen, ob eine Fußzeile gedruckt werden soll. Wenn ja, unterstützt ensochemLab die folgenden Modi:

Unterschriftsfeld auf jeder Seite drucken	Auf jeder Seite werden Unterschriftslinien gedruckt.
Unterschriftsfeld nur auf der letzten Seite drucken	Nur die letzte Seite enthält eine Fußzeile mit Unterschriftsfeldern.
Unterschriftsfeld nicht drucken	Es werden überhaupt keine Unterschriftsfelder gedruckt.

Übersicht beim Listendruck:

Hier können Sie angeben, wie viele Experimente auf eine Seite einer Listenübersicht gedruckt werden. Bei einer Standardinstallation enthält die Übersichtsseite zu jedem Experiment die Experimentnummer, die Reaktion und einige weitere Kopfdaten. Erhöhen Sie die Zahl der Experimente pro Seite, wird die Reaktion jedes Experiments kleiner gezeichnet, um weiteren Platz zur Verfügung zu stellen.

Weitere verfügbare Einstellungen:

Listenansicht als Deckblatt drucken	Gibt an, ob beim Ausdruck von Experimentlisten eine Listenübersicht als Deckblatt gedruckt werden soll.
Hinweis auf ungültiges Experiment drucken	Gibt an, ob beim Ausdruck von Experimentlisten für jedes ungültige Experiment in Hinweisblatt gedruckt werden soll. Ist diese Einstellung deaktiviert, werden solche Experimente einfach übersprungen.

Ausdruck von Farbe und Binärdaten:

Mit der Option „Farbdruck aktivieren“ können Sie einstellen, dass Sie in Farbe drucken möchten. Wenn Sie mit dieser Einstellung einen Schwarzweißdrucker verwenden, so werden alle Farben bestmöglich als Graustufen ausgegeben.

Außerdem können Sie für jede Art von Binärdaten getrennt auswählen, ob die zugehörigen Daten gedruckt werden sollen oder nicht.

Mit der Option „Automatisches drehen von PDF Seiten“ geben Sie an, ob Seiten innerhalb an Experimente angehängter PDF Dokumente, die eine andere Ausrichtung als Ihr aktueller Experimentdruckvorgang besitzen, automatisch gedreht werden sollen. Dies ist zum Beispiel dann der Fall, wenn Sie Ihr Experiment im Hochformat drucken, die darin enthaltene PDF Datei jedoch Seiten im Querformat enthält. Wenn Sie die Option aktivieren, werden diese Seiten um 90° gedreht ausgedruckt, um den vorhandenen Platz optimal auszunutzen und unnötige Verkleinerungen sowie damit einhergehende Qualitätsverluste zu vermeiden. Die eigentlichen Dokumente werden selbstverständlich nicht verändert.

17.7. MS Office Integration

Auf dieser Seite können Sie festlegen, wie ensochemLab mit verschiedenen Microsoft Office Produkten interagieren soll. Wenn diese Funktionalität aktiviert ist, können Sie Word Dokumente und Excel Arbeitsmappen direkt bei der Eingabe einer Experimentbeschreibung anlegen. Diese Dokumente können als Teil Ihres Experiments ausgedruckt werden. Auch direkte Änderungen sind möglich. (siehe Kapitel „Erstellen Sie Ihr erstes Experiment“).

Das Anzeigen der Dokumente als Vorschaubilder kann sich negativ auf die Performance auswirken. Sollte die Experimentanzeige zu langsam werden, können Sie die Funktion deaktivieren.

Sie können auch entscheiden, wie die Anwendung die Dokumente ausdrucken soll. Wenn Sie das Betriebssystem zum Ausdruck verwenden, werden die Dokumente jedoch nicht in die Seitennummerierung und das Layout von ensochemLab eingebunden.

Die Layoutoptionen legen Größe und Anordnung Ihrer Office Dokumente auf dem Ausdruck fest.

Die Einstellungen sind für Word und Excel separat möglich.

17.8. Eingabeassistent

Diese Seite ist nur verfügbar, wenn Sie über die Berechtigung verfügen, Experimente anzulegen.

Diese Einstellungen werden in den Eingabeassistenten übernommen, wenn Sie ein neues Experiment anlegen. Sie können bei den Feldern „Abteilung“, „Projekt“ und „Laboreinheit“ lediglich vom Administrator vordefinierte Abteilungen und Projekte auswählen. Eine Freieingabe ist an dieser Stelle nicht möglich.

Das Feld „Experiment Nummer vorbelegen mit“ ermöglicht die Eingabe eines Präfixes für Experimentnummern. Wenn Sie ein neues Experiment erstellen, müssen Sie an den hier angegebenen Wert lediglich noch ein eindeutiges Suffix anhängen und sparen somit die lästige Neueingabe langer Kennungen!

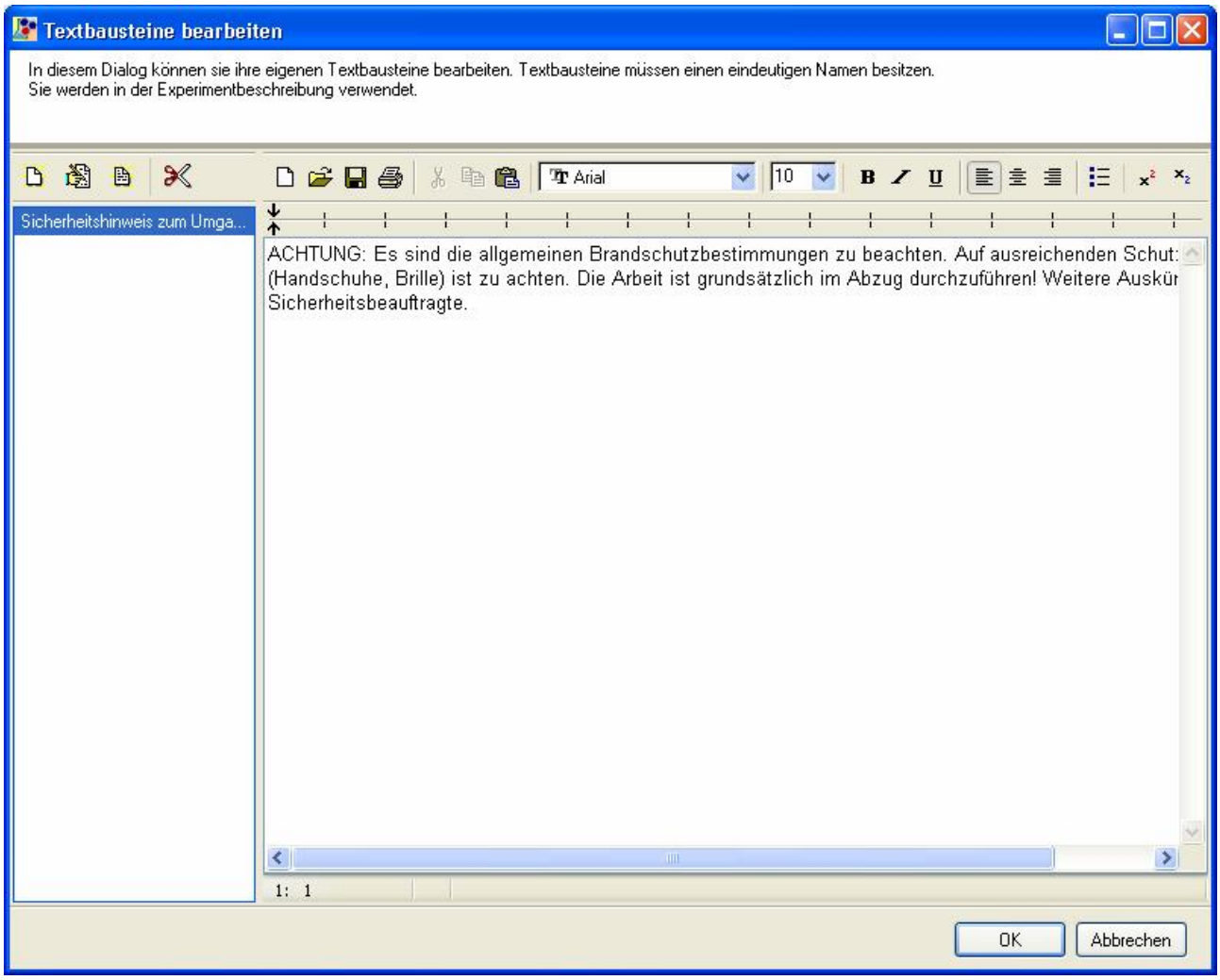
Außerdem können Sie die Standardsichtbarkeit von Experimenten ändern. Hierbei handelt es sich um den Wert, mit dem bei einem neuen Experiment das Feld „Sichtbarkeit“ vorbelegt sein soll. Diese Funktion steht nur zur Verfügung, wenn Ihr Administrator die Standardbenutzerverwaltung von ensochemLab aktiviert hat.

Abhängig von den Einstellungen Ihres Administrators können Sie die Werte einiger dieser Felder eventuell nicht ändern. Solche Felder sind in diesem Fall grau hintergelegt. Falls Sie keinen der Werte ändern dürfen, wird die gesamte Seite ausgeblendet.

Zusammenfassung:	Über den Einstellungs-Dialog können Sie ensochemLab Ihren persönlichen Anforderungen entsprechend einstellen. Er umfasst unter anderem Farben, Schriftarten und Standardwerte.

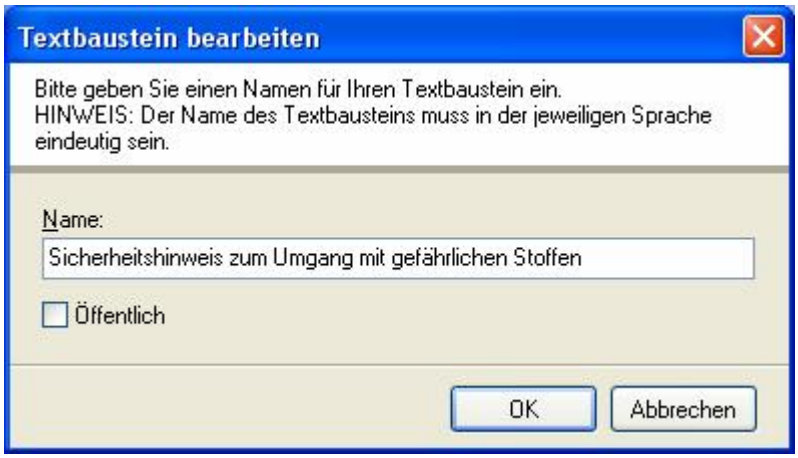
18. Benutzerdefinierte Textbausteine

Wie bereits im Kapitel „Erstellen Sie Ihr erstes Experiment“ angesprochen, können Sie nicht nur vom Administrator für alle Benutzer vordefinierte Textbausteine verwenden, sondern auch Ihre eigenen Textbausteine anlegen. Um dies zu tun, öffnen Sie bitte den entsprechenden Verwaltungsdialog, indem Sie im Hauptmenü unter „Optionen“ auf „Textbausteine bearbeiten“ klicken. Das folgende Fenster erscheint:


Textbausteine bearbeiten
In diesem Dialog können sie ihre eigenen Textbausteine bearbeiten. Textbausteine müssen einen eindeutigen Namen besitzen.
Sie werden in der Experimentbeschreibung verwendet.
Arial
10
Sicherheitshinweis zum Umga...
ACHTUNG: Es sind die allgemeinen Brandschutzbestimmungen zu beachten. Auf ausreichenden Schut
(Handschuhe, Brille) ist zu achten. Die Arbeit ist grundsätzlich im Abzug durchzuführen! Weitere Auskür
Sicherheitsbeauftragte.
1: 1
OK
Abbrechen

In der Liste auf der linken Seite sehen Sie die bereits angelegten Textbausteine. Wenn Sie Ihre Arbeit mit ensochemLab erst begonnen haben, ist diese Liste leer.

Um einen neuen Textbaustein anzulegen, klicken Sie bitte in der Symbolleiste auf „Neuer Textbaustein“. ensochemLab zeigt nun ein Fenster an, in dem Sie einen Namen für den neuen Textbaustein eingeben können. Wenn Ihr Administrator die entsprechende Funktion aktiviert hat, können Sie Ihren neuen Textbaustein als öffentlich markieren, damit er allen ensochemLab Benutzern zur Verfügung steht. Bitte beachten Sie, dass der Name in diesem Fall eindeutig sein muss. Ansonsten existieren jedoch keine weitergehenden Beschränkungen für mögliche Namen.


Textbaustein bearbeiten
Bitte geben Sie einen Namen für Ihren Textbaustein ein.
HINWEIS: Der Name des Textbausteins muss in der jeweiligen Sprache eindeutig sein.
Name:
Sicherheitshinweis zum Umgang mit gefährlichen Stoffen
Öffentlich
OK
Abbrechen

Nachdem Sie auf „OK“ geklickt haben, wird der Name als neuer Eintrag in die Liste auf der linken Seite eingefügt. Auf der rechten Seite befindet sich ein Eingabefeld, mit dem Sie den Text für den Baustein eingeben können. Jeder Textbaustein muss Text enthalten. Leere Textbausteine können nicht gespeichert werden.

Für den Text stehen Ihnen genau wie in der Versuchsbeschreibung reichhaltige Formatierungsmöglichkeiten bereit. Sie können außerdem Dateien im RTF oder TXT-Format von Ihrer lokalen Festplatte importieren.

Einzelne Textbausteine müssen nicht explizit gespeichert werden. Führen Sie einfach Ihre Änderungen durch, sobald Sie den Dialog mit „OK“ verlassen, werden diese alle zusammen in die Datenbank gespeichert.

Um einen bestehenden Textbaustein zu ändern, wählen Sie ihn einfach aus und ändern Sie dann den Text auf der rechten Seite des Fensters.

Um einen Textbaustein umzubenennen, klicken Sie bitte auf den Knopf „Textbaustein bearbeiten“. Es erscheint wieder das nun bereits bekannte Fenster zur Eingabe eines Namens.

Sie können einen Textbaustein natürlich auch löschen. Wählen Sie ihn dazu einfach aus und klicken Sie dann auf „Textbaustein löschen“.

Falls Sie einen neuen Textbaustein benötigen, der einem bestehenden sehr ähnelt und nur geringfügig geändert bzw. erweitert werden muss, können Sie einen Datensatz auch kopieren. Klicken Sie dazu einfach auf „Textbaustein kopieren“. Sie werden nun aufgefordert, einen Namen einzugeben. Unter diesem wird dann ein Textbaustein mit dem gleichen Inhalt wie das Original erstellt.

Um Ihre Änderungen zu speichern, verlassen Sie den Dialog einfach mit „OK“. Bei einem Klick auf „Abbrechen“ kehren Sie zu ensochemLab zurück, ohne Ihre Änderungen zu speichern.

Zusammenfassung:	Mit Textbausteinen speichern Sie verschiedene häufig verwendete Texte oder Textteile unter einem kurzen Titel ab, um sie dann mit wenigen Klicks in Beschreibungsdaten für z.B. Experimente einfügen zu können ohne sie jedes Mal neu einzutippen.

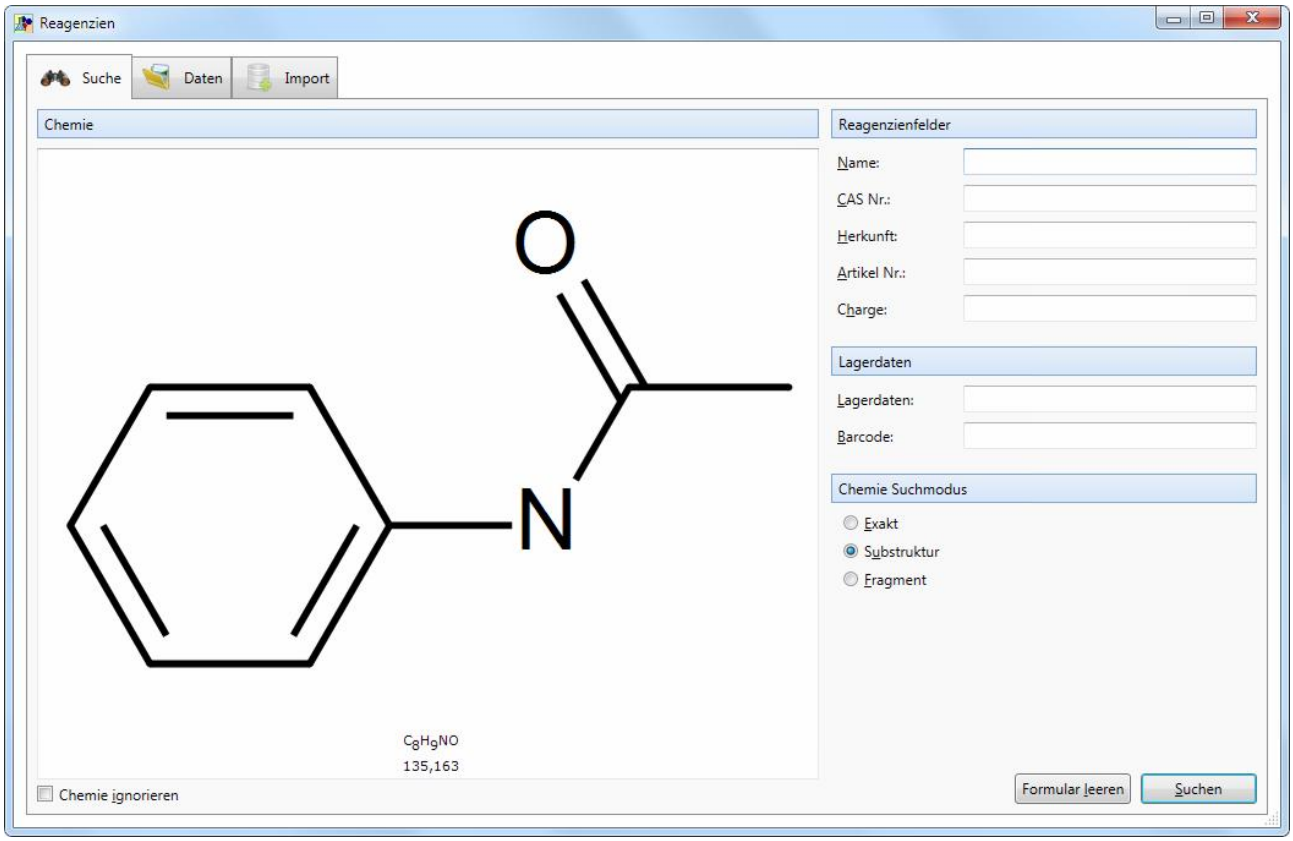
19. Die Reagenzien-Datenbank

Wie bereits in Kapitel 3.3. (Bearbeitung von Edukten im Eingabeassistenten) erwähnt, enthält ensochemLab eine Reagenziendatenbank. Aus dieser Datenbank können Sie über den Knopf „Katalogkomponente nachschlagen“ chemische Struktur, Molekulargewicht, Dichte, CAS-Nummer, Herkunft etc. übernehmen. Zu den einzelnen Reagenzien können auch Lagerdaten wie Standorte und Mengen angegeben werden.

Die Reagenziendatenbank wird vom Administrator verwaltet. Dieser kann einzelnen Benutzern das Recht erteilen, ebenfalls die Reagenziendaten zu pflegen. Wenn Sie über diese „Superuser“ Berechtigung verfügen, können Sie die Reagenziendatenbank über „Administration | Reagenzien bearbeiten“ öffnen, ansonsten über „Optionen | Reagenziendatenbank“.

Das Fenster der Reagenzienverwaltung beinhaltet die zwei Bereiche „Suche“, „Daten“ sowie für Administratoren und Superuser zusätzlich „Import“ zwischen denen Sie über die Tabs am oberen Rand wechseln können.

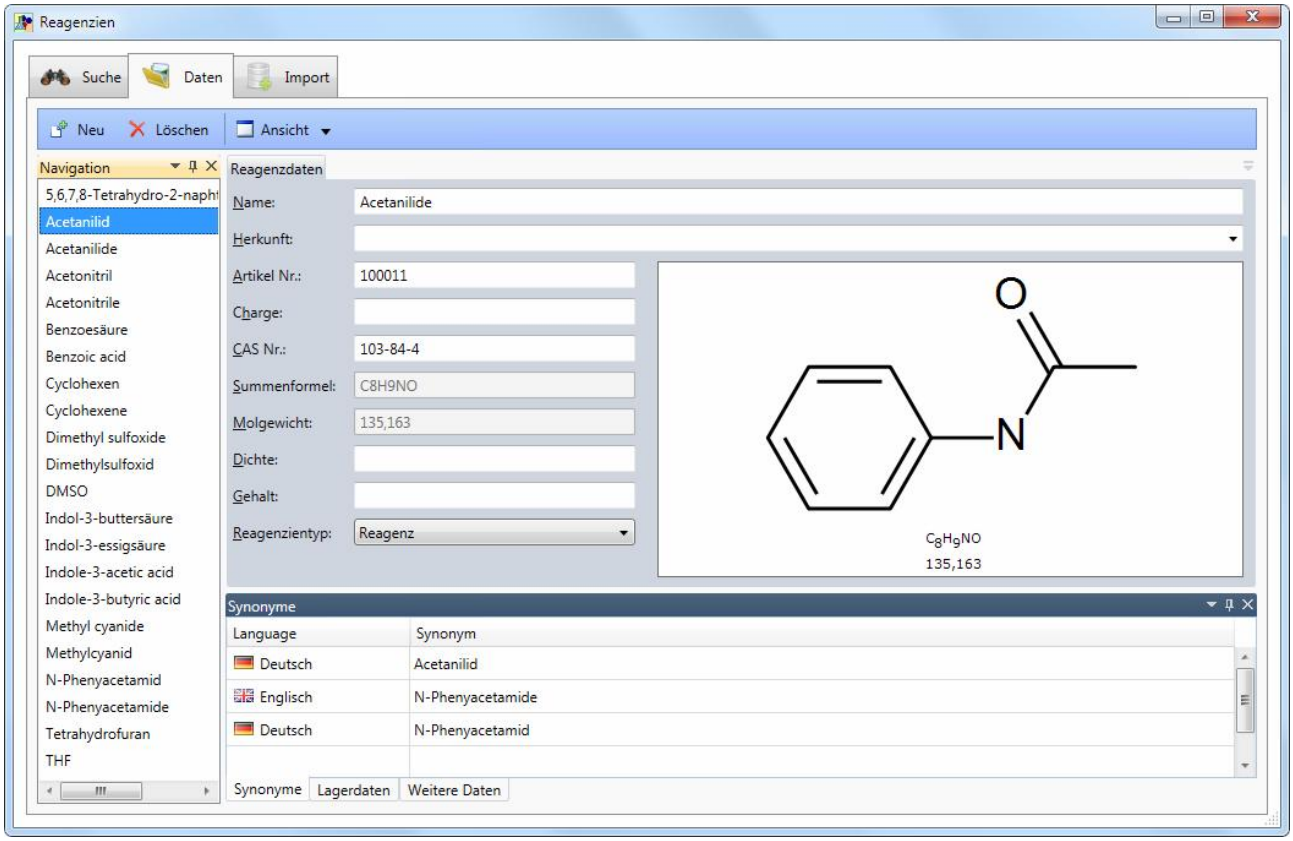
19.1. Reagenzien suchen



Auf dieser Seite können Sie Kriterien für eine Suche in der Reagenziendatenbank eingeben. Für einen Treffer müssen alle eingegebenen Kriterien zutreffen (UND Verknüpfung). Eine Suche nach Namen berücksichtigt auch alle eventuell vorhandenen Synonyme, unabhängig von der Sprache.

19.2. Reagenzien anzeigen

Auf der Seite „Daten“ sehen Sie die Ergebnisse einer Suche. Wenn Sie Administrator sind oder über die erforderliche „Superuser“ Berechtigung verfügen, können Sie hier auch neue Reagenzien eingeben oder bestehende Daten bearbeiten sowie löschen.

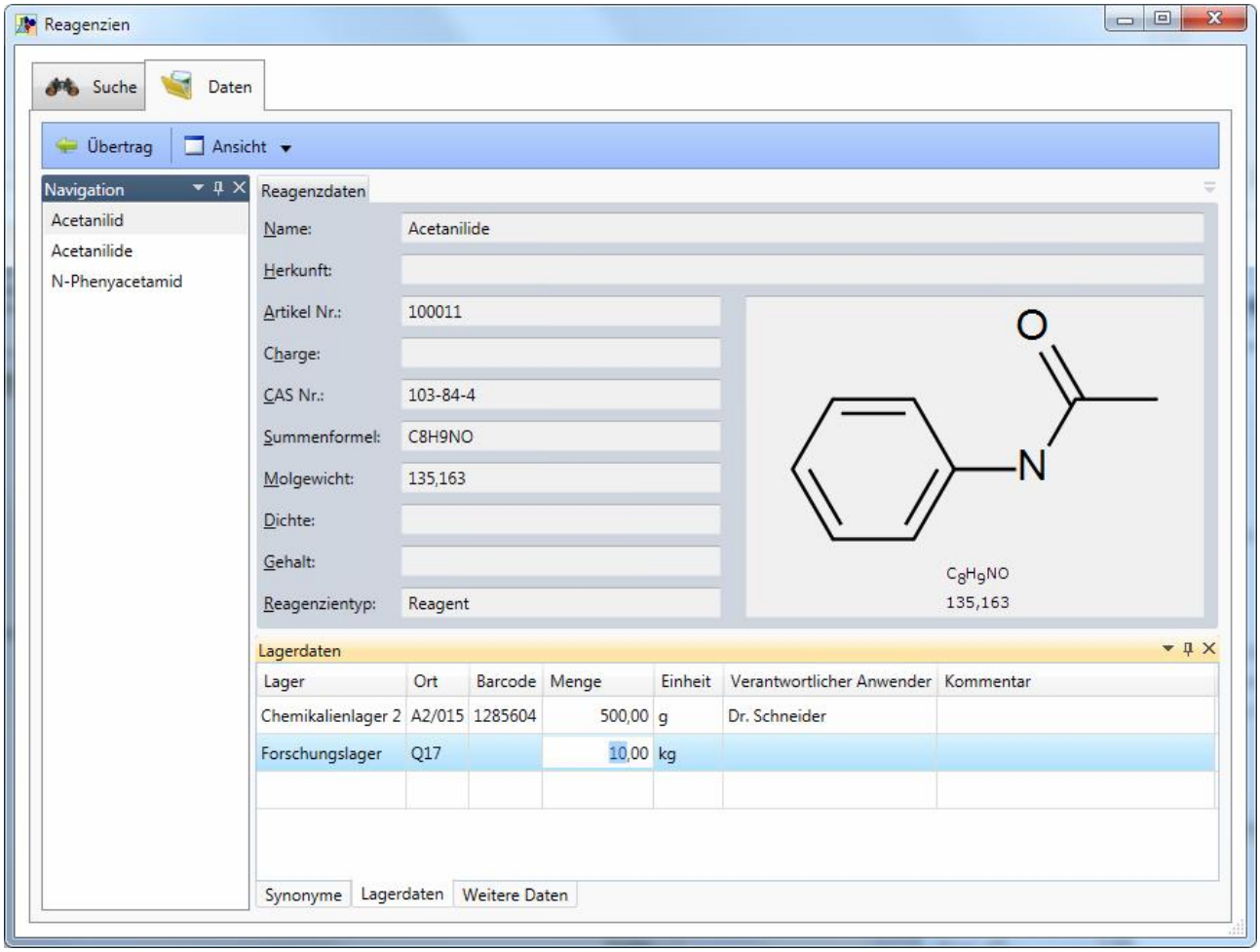


Dieses Bild zeigt das Fenster für einen Administrator bzw. einen Superuser. Für normale Anwender sind die Schalter „Neu“ und „Löschen“ nicht sichtbar.

Mit den Tabs am unteren Rand können Sie zwischen den Seiten zur Anzeige bzw. Bearbeitung von Synonymen, Lager- und Standortdaten sowie weiteren Daten umschalten.

Wenn Sie das Fenster aus dem Eingabeassistenten öffnen um Daten zu übernehmen steht in der Schalterleiste der Knopf „Übertrag“ zur Verfügung. Damit kommen Sie in den Assistenten zurück und übernehmen das ausgewählte Reagenz. Wenn Sie das nicht möchten schließen Sie das Fenster einfach.

Als Anwender ohne weitere Berechtigungen können Sie die Daten der Reagenzien nicht bearbeiten.

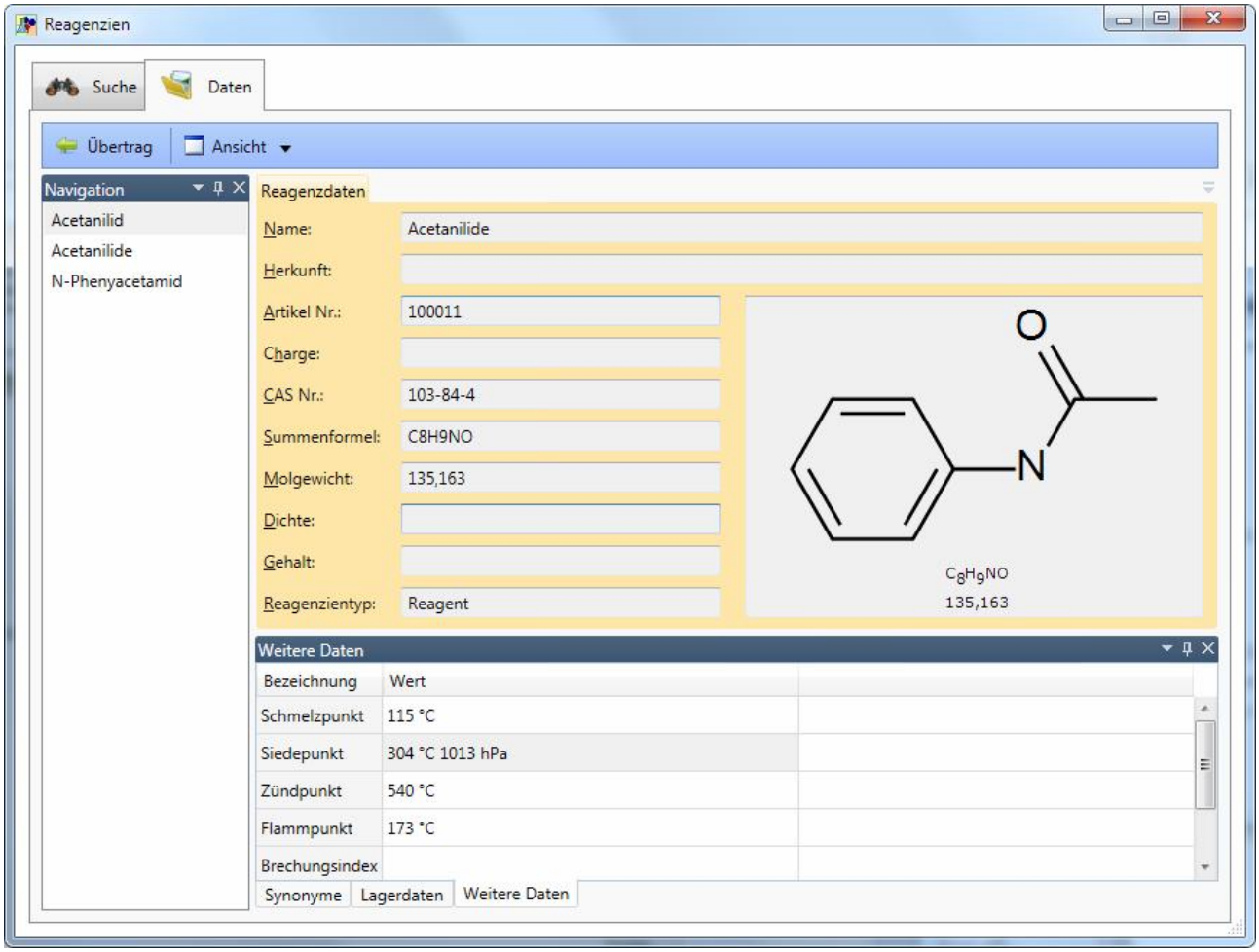


Ihr Administrator kann aber generell erlauben, dass alle Anwender Lagerdaten bearbeiten können. In diesem Fall können Sie z.B. Mengen aktualisieren wie im Bild gezeigt oder neue Standorte eingeben bzw. bestehende Standorte löschen.

Für einen neuen Standort klicken Sie in der letzten, noch leeren Zeile eine Zelle an. Sie gelangen in den Eingabemodus sobald Sie beginnen zu tippen. Mit einem Doppelklick gelangen Sie sofort in den Eingabemodus.

Um einen Standort zu löschen markieren Sie einfach die Zeile und drücken die Löschtaste.

Auf der Seite „Weitere Daten“ können Sie zusätzliche Daten zu einem Reagenz sehen und mit den nötigen Berechtigungen auch bearbeiten oder löschen.



20. Die Laborwerkzeuge

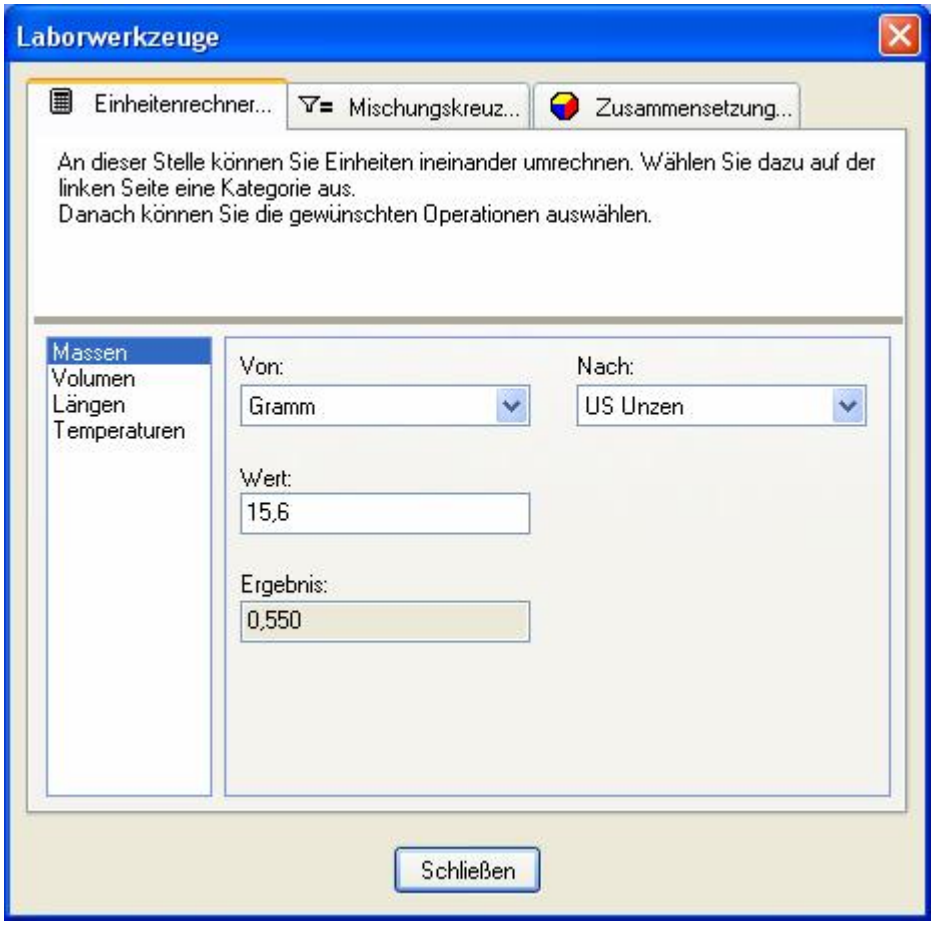
Für einige der alltäglichen grundlegenden Berechnungen im Chemielabor stellt ensochemLab Funktionen bereit, die außerhalb eines Experiments direkt verwendet werden können:

- Einheiten umrechnen
- Mischungskreuz berechnen
- Zusammensetzung anhand einer Summenformal berechnen

Um das Hilfsprogramm zu starten, klicken Sie bitte auf „Laborwerkzeuge“ im Menü „Optionen“.

20.1. Einheitenrechner

Wählen Sie bitte zunächst den Einheitenrechner. Es erscheint das folgende Fenster:

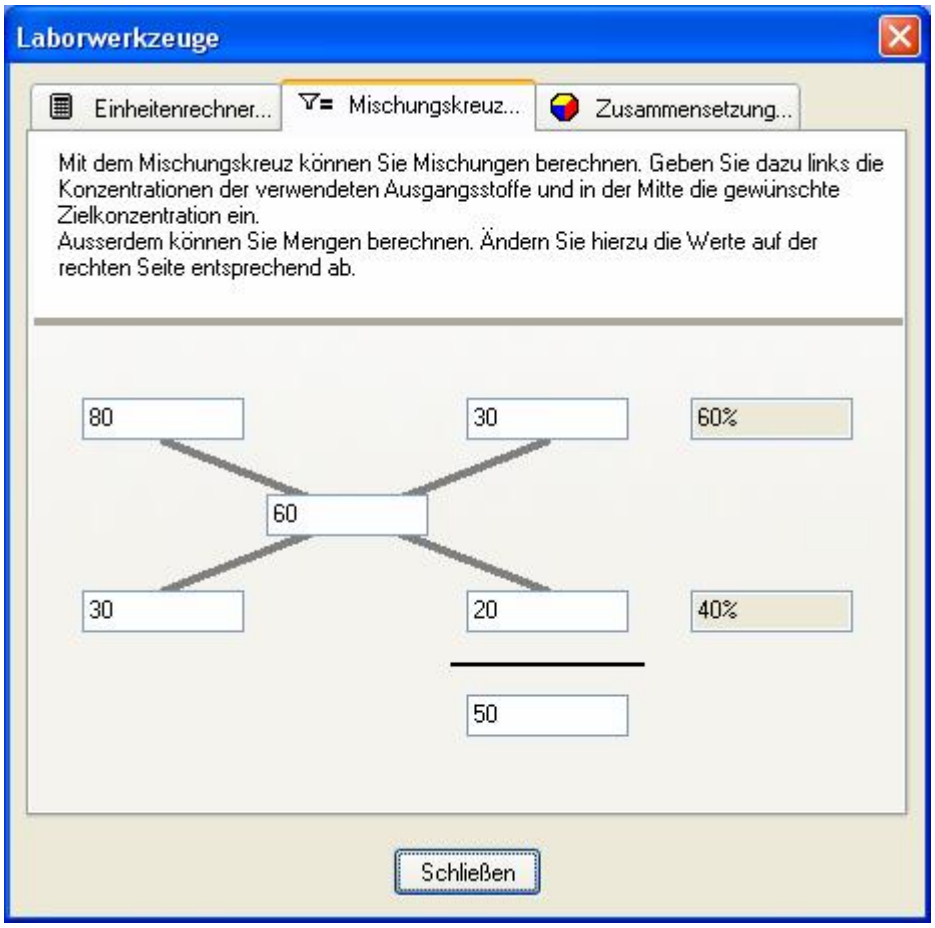


Wählen Sie zuerst auf der rechten Seite die gewünschte Kategorie aus. Danach können Sie mit Hilfe der beiden Auswahllisten angeben, welche Einheit Sie als Grundlage bzw. Ziel der Berechnung verwenden möchten. Geben Sie danach einen Wert ein. Sobald Sie das getan haben, erscheint automatisch das Ergebnis. Unsere Beispielrechnung (siehe Bildschirmfoto weiter oben) ergibt also:

15,6 Gramm = 0,550 US Unzen

20.2. Mischungskreuz

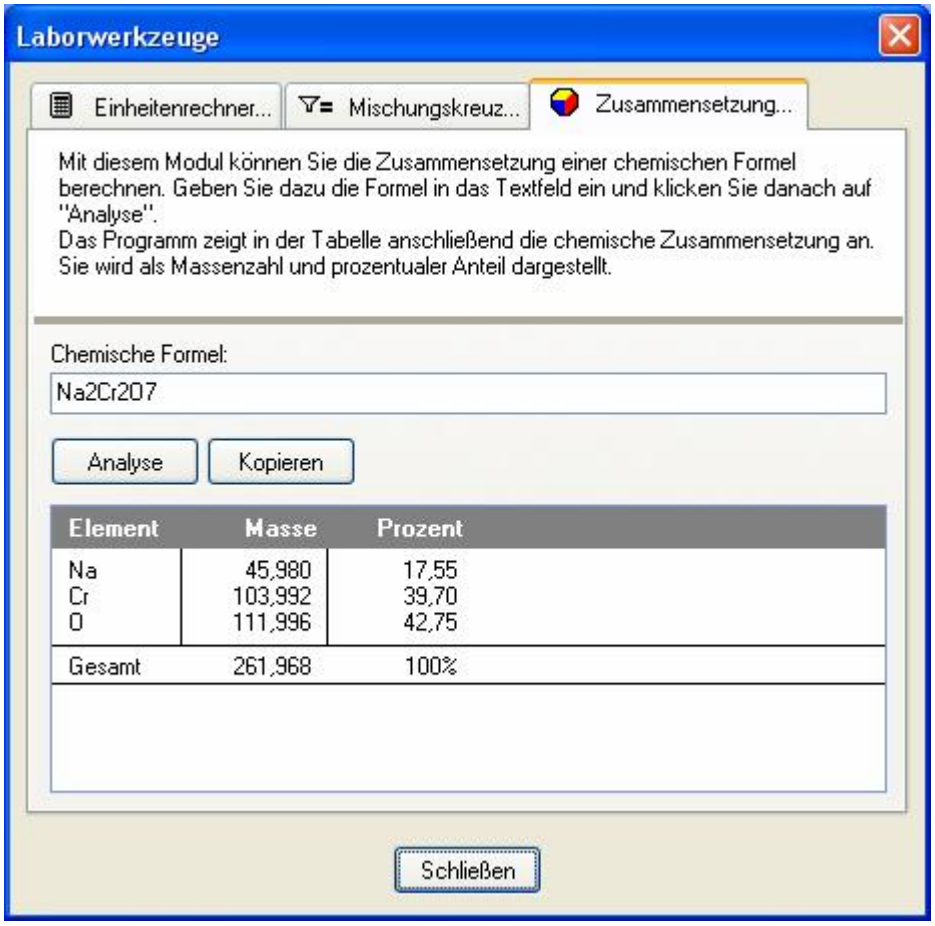
Als nächstes werfen wir einen Blick auf das Mischungskreuz, dazu klicken Sie bitte auf den entsprechenden Reiter.



Sobald Sie einen der Werte im Kreuz ändern, werden alle anderen Werte automatisch so verändert, dass die Relationen in Bezug auf Ihre Neuangabe korrekt sind.
Die Prozentzahlen können nicht direkt verändert werden, sondern nur die absoluten Werte.

20.3. Zusammensetzung berechnen

Als drittes Modul steht „Zusammensetzung“ zur Verfügung:



Geben Sie eine beliebige Summenformel in das Textfeld ein und klicken Sie danach auf “Analyse”. Es erscheint eine Tabelle nach folgendem Muster:

Element	Masse	Prozent
Na	45,980	17,55
Cr	103,992	39,70
O	111,996	42,75
Gesamt	261,968	100%

Für jedes enthaltene Element werden die absolute Masse und sein prozentualer Anteil an der Gesamtmasse aufgelistet. Die letzte Zeile zeigt noch einmal die Molare Masse des gesamten Moleküls und zur Kontrolle die Aufsummierung der Prozentzahlen.

Für das Formulieren der Summenformel zur Auswertung gibt es eine Reihe von Regeln:
Bei der Eingabe wird jeder Großbuchstabe zusammen mit allen ihm bis zum nächsten anderen Großbuchstaben oder Trennzeichen nachfolgenden Kleinbuchstaben als Element gewertet. Zahlen werden jeweils mit dem vorstehenden Element bzw. der vorstehenden Klammer multipliziert. Die Bestandteile eine Salzes werden mit * getrennt.

Die folgenden Beispiele verdeutlichen, wie ensochemLab eine Summenformel in ihre logischen Bestandteile zerlegt.

Beispiele:

HCl	H + Cl
NaCl2	Na + (Cl * 2)
Na(OH)2	Na + (O * 2) + (H * 2)
NaCl * H2O	Na + Cl zusammen mit (H * 2) + O
K Br	K + Br (Leerzeichen werden als Trennzeichen zwischen Elementen gewertet)

Ungültige Eingaben:

NaCL	L wird als weiteres Element „erkannt“
NaOH2	Lediglich das H-Atom wird mit 2 multipliziert
2H2O	Die Summenformel muss mit einem Element beginnen
OH-	Ladungen werden an dieser Stelle nicht unterstützt
Ds	Darmstadtium ist leider noch nicht als Element implementiert

Bitte beachten Sie, dass ensochemLab keine semantische Analyse vornimmt. Es ist also durchaus möglich, Konstrukte wie „CH13Cl“ und ähnliche berechnen zu lassen…

Zusammenfassung:	Die Laborwerkzeuge können einige der alltäglichen Berechnungen eines Chemielabors automatisch durchführen. Sie finden die Programme im Hauptmenü unter „Optionen“.

21. Anhang A: Glossar

Wir haben in diesem Handbuch über viele spezielle Fachausdrücke und Phrasen gesprochen, die in einer elektronischen Laborjournalführung verwendet werden. Dieses Kapitel soll einige Hilfestellungen anbieten und ein Nachschlagewerk für diese Ausdrücke bilden. Es ist in alphabetischer Reihenfolge strukturiert.

Abmelden

Wenn Sie das Programm beenden oder über die Funktion „Datei“ / „Anmeldung“ im Menü des Hauptfensters zum Anmeldebildschirm zurückkehren, werden Sie abgemeldet. Dies bewirkt, dass Sie nicht länger mit der Datenbank verbunden sind und ein anderer Benutzer auf diesem Computer mit ensochemLab arbeiten kann.

Administrator

Ein oder mehrere Anwender können Administratoren sein. Diese spezielle Berechtigung ermöglicht Ihnen, Einstellungen zu verwalten, die für alle Benutzer gelten. Beispiele sind die vordefinierten Listen für Herkunft, Lösungsmittel, etc.

Anmeldung

Wenn Sie sich anmelden, authentifizieren Sie sich gegenüber dem Datenbanksystem. Dies garantiert Datensicherheit und stellt Ihnen Ihre persönlichen Einstellungen zur Verfügung.
Sie müssen sich bei jedem Start von ensochemLab anmelden. Dies kann je nach Konfiguration allerdings auch automatisch geschehen (siehe Kapitel „Anmeldung“).

Anzeigelayout

Ein Anzeigelayout beinhaltet einen Satz von Einstellungen der Experimentanzeige wie gerade sichtbare Kapitel, ihre Reihenfolge, Spaltenbreiten, usw.

Auswahlliste

Eine Auswahlliste enthält von Ihrem Administrator vordefinierte Elemente. Sie können eines davon für den jeweils aktuellen Datensatz auswählen, an dem Sie gerade arbeiten. Meistens können Sie jedoch auch eine freie Neueingabe vornehmen. Diese Eingabe wird dann allerdings nicht bei anderen Datensätzen oder Benutzern zur Verfügung stehen.
Die Projekte, zum Beispiel, stehen als Auswahlliste zur Verfügung.

Benutzername

Dieser Name wurde Ihnen vom Administrator zugeteilt und identifiziert Sie gegenüber der Datenbank. Damit kann ensochemLab zum Beispiel den Ersteller eines Experiments identifizieren.
Eine Anmeldung ist nur in Kombination mit dem zugehörigen Kennwort möglich.

Berechtigungen

Beim Erstellen Ihres Benutzerkontos hat Ihr (Datenbank-)Administrator Ihnen gewisse Berechtigungen zugewiesen. Dies bedeutet, dass Sie innerhalb des Programms einige Operationen durchführen können. So können Sie zum Beispiel das Recht zum Bearbeiten von Experimenten haben, oder dasjenige zum Verändern benutzerübergreifender Einstellungen (Verwaltungsaufgaben).

Besitz

Ein Experiment kann nur von seinem Besitzer verändert werden. Wenn Sie ein Experiment erstellen, besitzen Sie es automatisch.
Sollte Ihr Administrator die Übernahme von Experimenten aktiviert haben, so können das Experiment eines Kollegen übernehmen, indem Sie auf „Besitz übernehmen“ im Hauptmenü (unter „Experiment“) klicken.

Benutzerkonto
Siehe „Konto“

Benutzerverwaltung
Die Standardbenutzerverwaltung in ensochemLab dient zum Administrieren von Benutzern, Standorten, Abteilungen und Laboren sowie den entsprechenden Verknüpfungen. (Benutzer A gehört zu Labor B, etc.)

Binärdaten
Diese Art von Daten ist wie ein Anhang an eine E-Mail: Es kann jede Art von externer Datei sein, wie zum Beispiel ein Word-Dokument, ein Bild oder auch Daten von einem Analysesystem eines Drittherstellers. Innerhalb von ensochemLab können Sie Binärdaten zu Ihrer Beschreibung und zu Ihren Analytikdaten speichern.

Block
Ein Block ist dasselbe wie ein Kapitel. Die Anzeige ist in Kapitel unterteilt. Die Reaktion, zum Beispiel, ist ein solches Kapitel und die Beschreibung ein Weiteres.

Client
Dies ist der lokale Teil Ihrer ensochemLab Installation. Es ist das Programm, das Sie sehen und für Ihre Eingaben verwenden. Alle Daten werden zu einem Server gesendet bzw. von dort bezogen.

Datenbank
Die Datenbank ist der Ort, an dem ensochemLab alle Daten speichert (Experimente, Einstellungen, …). Neben der reinen Datenhaltung werden hier auch Verknüpfungen zwischen den einzelnen Datensätzen (Experiment <-> Referenzexperiment, Benutzer <-> seine Einstellungen, …) ausgewertet.

Datensatz
ensochemLab speichert alle Daten in Datensätzen. Alle zusammengehörigen Daten bilden jeweils einen Datensatz. Analytikdaten, Edukte und so weiter sind alles Datensätze, sogar das Experiment selbst.

EC_LAB_ADMIN
Diese Oracle-Rolle kombiniert die Rolle EC_LAB_REG mit der Berechtigung, Einstellungen für alle ensochemLab Benutzer im Administrationsdialog festzulegen.
Diese Berechtigung ist nur verfügbar, wenn Sie Oracle als Datenbanksystem verwenden.

EC_LAB_READ
Benutzer, denen diese Oracle-Rolle erteilt wurde, können alle Experiment in der Datenbank schreibgeschützt anzeigen.
Diese Berechtigung ist nur verfügbar, wenn Sie Oracle als Datenbanksystem verwenden.

EC_LAB_REG
Diese Oracle-Rolle verbindet die Rolle EC_LAB_READ mit der Berechtigung, eigene Experimente zu erstellen, zu bearbeiten und zu löschen.
Diese Berechtigung ist nur verfügbar, wenn Sie Oracle als Datenbanksystem verwenden.

Edition
ensochemLab kann für die speziellen Bedürfnisse Ihres Unternehmens angepasst werden, indem eine spezielle Edition entwickelt wird. Dies bedeutet jedoch, dass die Bilder dieses Handbuchs und aller weiteren Teile der Dokumentation je nach installierter Edition abweichen können.

ensochemEditor
Dieses Modul ist der in ensochemLab enthaltene Editor, der für das Zeichnen von chemischen Strukturen und Reaktionen verwendet werden kann. Natürlich können Sie in Ihren persönlichen Einstellungen jederzeit einen anderen Editor konfigurieren.

Exakte Fragmentsuche

Bei dieser Suche muss mindestens ein Fragment des Moleküls in der Datenbank chemisch exakt mit Ihrer Suchanfrage übereinstimmen, um gefunden zu werden. Dieser Suchmodus ist nicht bei allen Chemiedatenbanken verfügbar.

Exakte Suche

Bei einer exakten Struktursuche muss das Molekül oder die Reaktion in der Datenbank chemisch genau mit Ihrer Suchabfrage übereinstimmen, um gefunden zu werden.

Experiment Protokoll

Siehe „Protokoll“

Experiment Verweis

Ein Verweis auf ein Experiment ist eine Information, die lediglich angibt, um welches Experiment es sich handelt und wo es in der Datenbank zu finden ist. Dadurch kann ensochemLab ein Experiment in mehrere Ordner eingliedern, ohne es tatsächlich mehrfach speichern zu müssen.

Experiment Zwischenspeicher

Siehe „Zwischenspeicher”

Finalisiert

Finalisiert ist eine Statusbeschreibung. Solche Experimente können nicht weiter verändert werden, es sei denn, Sie werden auf den Status „in Arbeit“ zurückgesetzt.

Fließkommawert

Ein Fließkommawert ist eine Dezimalzahl wie z.B. 0,5.

Folgeexperiment

Bei einem Folgeexperiment wird ein Produkt eines Experiments als Edukt für ein neues Experiment verwendet.

Fraktion

Eine Fraktion enthält die prozentuale Zuordnung von Edukt- und Produktmassen (bzw. –Flächen) in Relation zum gesamten Reaktionsgemisch sowie weitere dazugehörige Daten. Sie ist eine Momentaufnahme zu einem genau festgelegten Zeitpunkt.

ID

Eine ID ist ein eindeutiger Bezeichner für einen speziellen Datensatz. Ihre Experimentnummern, zum Beispiel, sind IDs.

In Arbeit

In Arbeit ist eine Statusbeschreibung. Es markiert, dass das Experiment weiterhin bearbeitet werden kann. Solche Experimente sind meistens noch im Entstehen und recht aktuell.

Kennwort

Ein Kennwort ist eine geheime Zeichenfolge, die Sie zusammen mit Ihrem Benutzernamen gegenüber der Datenbank authentifiziert.

Komponente

Eine Komponente ist ein Teil (Edukt oder Produkt) in einer Fraktion.

Konto

Ein Benutzerzugang, der durch die Kombination von einem eindeutigen Benutzernamen und dem dazugehörigen Kennwort definiert wird. Im können persönliche Einstellungen wie Farben und Ordner zugewiesen sein.

Laborwerkzeuge

Die Kategorie Laborwerkzeuge umfasst einige nützliche Werkzeuge für alltägliche Aufgaben im Labor.

Liste

Eine Liste ist im Allgemeinen eine Sammlung von Datensätzen. Der Typ der gespeicherten Daten hängt von den einzelnen Datensätzen selbst ab. ensochemLab arbeitet immer mit Listen. Wenn Sie ein Experiment bearbeiten oder löschen möchten, müssen Sie es in eine Liste einfügen, zum Beispiel indem Sie danach suchen.

Login

Siehe „Anmeldung“

Mehrsprachigkeit

ensochemLab ist mehrsprachig. Sie können das Programm in Deutsch, Englisch und Französisch verwenden. Klicken Sie im Anmeldedialog auf die Flagge und dann auf die gewünschte Sprache, um eine andere Sprache zu verwenden. Vor der Anmeldung benutzt ensochemLab immer die bei der letzten Anmeldung gewählte Sprache.

Modul

Ein Modul ist Teil eines Programms wie ensochemLab. Jedes Modul hat spezielle Aufgaben, die es durchführt. Zu ist ein Modul zum Beispiel für das Editieren von Chemiedaten zuständig und ein Weiteres für das Drucken.

MOL-Datei

So wie ein Word-Dokument Text speichert, so speichert eine MOL-Datei eine chemische Struktur.

Molprozent

Siehe Kapitel 3 („Erstellen Sie Ihr erstes Experiment“). Es beginnt auf Seite 3.

MSXML

MSXML steht für eine Anzahl von Bibliotheken des Betriebssystems, die ensochemLab für den Zugriff auf den Server verwendet. Sollten Sie eine Fehlermeldung über diese Dateien erhalten, wenden Sie sich bitte an Ihren Administrator.

Pixel

Ein Pixel ist die logische Maßeinheit für die Anzeige und Berechnung von Graphiken im Computer. Im Normalfall entspricht ein Pixel auf dem Bildschirm 0,28 mm. Dies hängt jedoch von Ihrer Bildschirmauflösung ab, daher sollten Sie nicht exakt von diesem Wert ausgehen.

Privilegien

Siehe „Berechtigungen“.

Protokoll

Verschiedene Aktionen wie die Besitzübernahme an einem Experiment oder das Zurücksetzen seines Status auf „in Arbeit“ werden in der Datenbank protokolliert. Dies bedeutet, dass ein Administrator nachvollziehen kann, wer wann und wieso diese Aktionen durchgeführt hat.
Wenn dies aktiviert ist, können auch normale Benutzer an diese Informationen gelangen, indem Sie die Maus über das Protokoll-Symbol in der Statusleiste bewegen.

Rechte

Siehe “Berechtigungen”

Referenzedukt

Das Referenzedukt ist die Basis für alle Berechnungen, die die resultierenden Stoffmengen betreffen. Es hat immer ein Äquivalent von 1. Beispiel: Die Ausbeute eines Produktes ist die Menge des Produktes im Vergleich zur Menge des Referenzeduktes.

Rich Text

Siehe „RTF Format“

RSS

RSS steht für den englischen Begriff „**R**eaction **S**ubstructure **S**earch” und bedeutet, dass eine Reaktion nur die Anfrage beinhalten muss, um ein Treffer zu sein. Wenn Ihre Suche zum Beispiel zwei Edukte und ein Produkt enthält, findet ensochemLab alle Reaktionen, die mindestens diese beiden Edukte und dieses Produkt (wenn auch als Teilstück) enthalten.

RTF Format

RTF steht für den englischen Begriff „**R**ich **T**ext **F**ormat” und bedeutet, dass Sie Ihren Text mit Fettschrift, Kursivdruck, verschiedenen Schriftarten sowie vielen weiteren Optionen formatieren können.

Rückgängig

Wenn Sie sich in einem Dialog befinden, können Sie Ihre Änderungen meistens mit einem Klick auf „Abbrechen“ rückgängig machen. Allerdings gibt es hierbei einige Ausnahmen wie zum Beispiel den Dialog zur Administration von Zielmolekülen. Diese Dialoge kennzeichnen dies mit einer speziellen Notiz in ihrer Beschreibung.

RXN-Datei

So wie ein Word-Dokument Text speichert, enthält eine RXN-Datei eine chemische Reaktion.

Server

Der Server ist der entfernte Teil Ihrer ensochemLab Installation. Alle Ihre Daten werden für Speicherung und Bearbeitung dorthin gesendet. Danach werden die Ergebnisse zurück zu Ihrem Client übertragen.

Service

Siehe „Server“.

Sichtbarkeit

Wenn Sie keine Benutzerverwaltung verwenden, ist jedes Experiment grundsätzlich für jeden Benutzer sichtbar. Wenn Sie die Standardbenutzerverwaltung verwenden, können Sie einstellen, welche Benutzergruppe das Experiment anzeigen darf.

Sitzung

Eine Sitzung umfasst die Zeit zwischen An- und Abmeldung sowie alle währenddessen durchgeführten Aktionen.

SSS

SSS steht für den englischen Begriff „**S**ub**S**tructure **S**earch”. Dies bedeutet, dass die gesuchte Struktur lediglich Teil einer anderen Struktur sein muss, damit diese Teil der Trefferliste wird.

Status

ensochemLab unterstützt zwei verschiedene Stati für Experimente: „in Arbeit“ und „Abgeschlossen“. Experimente mit Status „Abgeschlossen“ können nicht mehr verändert werden.

Substruktursuche

Siehe „SSS“

Textbaustein

Ein Textbaustein ist ein häufig verwendeter Textblock, der zum schnellen Einfügen in z.B. die Durchführungsbeschreibung als Vorlage abgespeichert wurde. Weitere Informationen finden Sie im Kapitel „Benutzerdefinierte Textbausteine“.

Version

Die Version eines Moduls gibt an, wie aktuell es ist. Je höher die ersten Teile der Versionsnummer sind, desto neuer ist das Modul. Beispiel: Version „1.1.0.3“ ist neuer als Version „1.0.2.5“.

Zielmolekül

Ein Zielmolekül ist ein Produkt, dass Sie als dasjenige gewählt haben, das Sie mit einer oder mehreren Reaktionen eines Projektes herstellen möchten. Sie können spezielle Namen dafür definieren, wie zum Beispiel Handelsnamen und Synonyme.
Reaktionen, die ein Zielmolekül enthalten, können als Ganzes weder bearbeitet noch gelöscht werden, genauso wie das Produkt selbst, das als Zielmolekül eingetragen ist.
Bitte beachten Sie, dass es pro Reaktion nur ein Zielmolekül geben kann.

Zwischenspeicher

Um schnelleren Zugriff auf Experimente zu ermöglichen, speichert ensochemLab alle bereits in dieser Sitzung angezeigten Experimente im Arbeitsspeicher. Dies wird „Zwischenspeicherung“ genannt und der hierfür reservierte Speicherbereich heißt „Zwischenspeicher“.
Wenn ein Experiment von einem anderen Benutzer geändert wird und Sie seine Änderungen sehen möchten, so müssen Sie den Zwischenspeicher mit Hilfe der zugehörigen Funktion im Hauptmenü (unter „Optionen“) leeren.
Eine solche Leerung findet automatisch bei jeder Abmeldung statt.

22. Anhang B: Felder und Suchmodi

Die folgende Auflistung beschreibt alle Felder, in denen über ensochemLab gesucht werden kann und definiert, welcher Suchmodus für welches Feld gewählt wird.

Experimentkopf:

Feld	Suchmodus
Abteilung	Textsuche mit Auswahlmöglichkeit für vom Administrator vordefinierte Abteilungen
Benutzer ID	Textsuche
Benutzername	Textsuche
Beurteilung	Textsuche mit Auswahlmöglichkeit für vom Administrator vordefinierte Beurteilungen
Datum finalisiert	Datumssuche
Experimentnummer	Textsuche
Kommentar	Textsuche
Projekt	Textsuche mit Auswahlmöglichkeit für vom Administrator vordefinierte Projekte
Status	Auswahlmöglichkeit eines Experimentstatus – keine Freieingabe möglich
Stufe	Textsuche
Versuchsdatum	Datumssuche
Versuchsreihe	Textsuche
Zweck	Textsuche

Reaktion:

Feld	Suchmodus
Text über dem Reaktionspfeil	Textsuche
Text unter dem Reaktionspfeil	Textsuche

Edukte:

Feld	Suchmodus
Artikelnummer	Textsuche
Auf Trägersubstanz	Ja / Nein – Abfrage
Beladung	Numerische Suche
CAS Nr.	Textsuche
Charge	Textsuche
Dichte	Numerische Suche
Gehalt	Numerische Suche
Gehalt / Einheit	Numerische Suche nach einem Gehalt mit Angabe der zugehörigen Einheit als Auswahl der in ensochemLab registrierten Einheiten

Gehaltseinheit	Textsuche mit Auswahlmöglichkeit für vom Administrator vordefinierte Gehaltseinheiten
Herkunft	Textsuche mit Auswahlmöglichkeit für vom Administrator vordefinierte Herkünfte
Menge	Numerische Suche
Menge / Einheit	Numerische Suche nach einer Menge mit Angabe der zugehörigen Mengeneinheit als Auswahl der in ensochemLab registrierten Einheiten
Mengeneinheit	Textsuche mit Auswahlmöglichkeit für vom Administrator vordefinierte Mengeneinheiten
Mol	Numerische Suche
Mol / Einheit	Numerische Suche nach einer Mol-Anzahl mit Angabe der zugehörigen Mengeneinheit als Auswahl der in ensochemLab registrierten Einheiten
Molare Masse	Numerische Suche
Moleinheit	Textsuche mit Auswahlmöglichkeit für vom Administrator vordefinierte Moleinheiten
Molekülbeschriftung	Textsuche
Molprozent	Numerische Suche
Name	Textsuche
Referenzexperiment	Textsuche
Trägersubstanz	Textsuche mit Auswahlmöglichkeit für vom Administrator vordefinierte Trägersubstanzen
Typ	Auswahlmöglichkeit eines Edukttyps – keine Freieingabe möglich

Zusätzliche Eduktdaten:

Hierbei handelt es sich um vom Administrator definierte zusätzliche Datenfelder. Ihr Typ hängt deshalb von der entsprechenden Felddefinition ab. Bei Fragen wenden Sie sich bitte an Ihren zuständigen Betreuer oder Administrator.

Produkte:

Feld	Suchmodus
Auf Trägersubstanz	Ja / Nein – Abfrage
Ausbeute	Numerische Suche
Beladung	Numerische Suche
CAS Nr.	Textsuche
Charge	Textsuche
Gehalt	Numerische Suche
Gehalt / Einheit	Numerische Suche nach einem Gehalt mit Angabe der zugehörigen Einheit als Auswahl der in ensochemLab registrierten Einheiten
Gehaltseinheit	Textsuche mit Auswahlmöglichkeit für vom Administrator vordefinierte Gehaltseinheiten
Menge	Numerische Suche
Menge / Einheit	Numerische Suche nach einer Menge mit Angabe der zugehörigen Mengeneinheit als Auswahl der in ensochemLab registrierten Einheiten
Mengeneinheit	Textsuche mit Auswahlmöglichkeit für vom Administrator vordefinierte Mengeneinheiten
Mol	Numerische Suche
Mol / Einheit	Numerische Suche nach einer Mol-Anzahl mit Angabe der zugehörigen

	Mengeneinheit als Auswahl der in ensochemLab registrierten Einheiten
Molare Masse	Numerische Suche
Moleinheit	Textsuche mit Auswahlmöglichkeit für vom Administrator vordefinierte Moleinheiten
Molekülbeschriftung	Textsuche
Name	Textsuche
Substanzcode	Textsuche
Trägersubstanz	Textsuche mit Auswahlmöglichkeit für vom Administrator vordefinierte Trägersubstanzen
Typ	Auswahlmöglichkeit eines Produkttyps – keine Freieingabe möglich
Zielmolekül	Textsuche

Zusätzliche Produktdaten:

Hierbei handelt es sich um vom Administrator definierte zusätzliche Datenfelder. Ihr Typ hängt deshalb von der entsprechenden Felddefinition ab. Bei Fragen wenden Sie sich bitte an Ihren zuständigen Betreuer oder Administrator.

Durchführung:

Feld	Suchmodus
Binärdaten Dateiname	Textsuche
Binärdaten Kurzinfo	Textsuche
Binärdaten Titel	Textsuche
Text (groß- / klein abhängig)	Textsuche

Reaktionsparameter:

Feld	Suchmodus
Alphanumerischer Wert	Textsuche
Einheit	Textsuche
Kommentar	Textsuche
Name	Textsuche
Numerischer Wert	Numerische Suche

Tab. Durchführung:

Feld	Suchmodus
Datum	Datumssuche
Kommentar	Textsuche
Menge	Textsuche
Temperatur	Textsuche
Zeit	Textsuche

Literatur:

Feld	Suchmodus
Artikel	Textsuche

Ausgabe	Textsuche
Autoren	Textsuche
Bemerkungen	Textsuche
Buch	Textsuche mit Auswahlmöglichkeit für vom Administrator vordefinierte Literatureinträge
Endseite	Textsuche
Jahr	Numerische Suche
Patent Nr.	Textsuche
Startseite	Textsuche
URL	Textsuche

Analytik:

Feld	Suchmodus
Bedingung	Textsuche
Bemerkungen	Textsuche
Binärdaten Dateiname	Textsuche
Binärdaten Kurzinfo	Textsuche
Binärdaten Titel	Textsuche
Ergebniswert Einheit	Textsuche
Ergebniswert max.	Numerische Suche
Ergebniswert min.	Numerische Suche
Ergebniswert Text	Textsuche
Lösungsmittel	Textsuche
Methode	Textsuche mit Auswahlmöglichkeit für vom Administrator vordefinierte Methoden
Probennummer	Textsuche
Verweis	Textsuche

23. Anhang C: Erweiterungen

ensochemLab bietet verschiedene Funktionen, die jedoch nicht in der Standardversion enthalten sind. Hierbei werden zwei verschiedene Kategorien unterschieden:

- Zusätzlich erhältliche Erweiterungen
  Diese Erweiterungen sind über unsere Vertriebspartner erhältlich und müssen gesondert auf dem ensochemLab Server installiert werden (z.B.: Modul für die Versionsverwaltung).

- Optional freischaltbare Erweiterungen
  Diese Funktionen können in Absprache mit der enso Software GmbH oder einem unserer Vetriebspartner frei geschaltet werden. Eine gesonderte Installation ist hierbei nicht nötig.

Die Erweiterungen können Funktionen, Datenfelder und Abläufe betreffen. Elemente der ersten Kategorie werden im Handbuch normal erklärt, es wird jedoch jeweils darauf hingewiesen, dass sie unter Umständen nicht zur Verfügung stehen.

Erweiterungen der zweiten Kategorie sind in den meisten Fällen für spezielle Einsatzfelder gedacht und werden daher im Handbuch ausgespart. Sollten Sie eine solche Erweiterung aktiviert haben, erhalten Sie unter Umständen eine gesonderte Dokumentation bzw. Kurzbeschreibung. Verfügbar sind hierbei:

- Erweiterungen für Metallchemie
  Hierbei werden die Eduktdaten um die folgenden Felder ergänzt:
  - Ist Metallverbindung
  - Metallgehalt

  Die Produkte enthalten zusätzlich:
  - Ist Metallverbindung
  - Metallgehalt
  - Metallausbeute